高移動度有機材料の単一配向膜を利用した光電子強度マッピング

Photoemission intensity mapping utilizing one-dimensionally oriented organic thin film 1. 筑波大数理, 2. 分子研, 3. 千葉大院

O岩澤柾人¹,小林辰之輔¹,長谷川友里²,野崎美沙³,栗原俊平³,大瀧峻也³, ニ木かおり³,佐々木正洋¹,松井文彦²,解良聡²,山田洋一¹

1.Tsukuba Univ., 2.IMS, 3.Chiba Univ. OM. Iwasawa¹, S. Kobayashi¹, Y. Hasegawa², M. Nozaki³, S. Kurihara³, S. Otaki³, K. Niki³, M. Sasaki¹, F. Matsui², S. Kera², Y.Yamada¹

E-mail: mstiwsw@gmail.com

[緒言]

光電子角度分布 (PAD)による分子軌道トモグラフィーが世界的に精力的に研究され始めたが、 その対象は未だモデル分子にとどまっている。本研究ではこれを実用的な高移動度有機半導体材 料薄膜に応用し、それらのキャリア伝導機構の詳細解明に資すことを目指す。

ここでは特に、picene や Dph-BTBT の、比較的単純な構造の高移動度有機半導体材料に着目 した。最近の理論研究では、picene 薄膜の移動度は HOMO により概ね理解できるのに対し、BTBT 薄膜では HOMO-1 の寄与を考慮に入れる必要があることが示された[1]。分子軌道トモグラフィー により薄膜中のこれらの軌道の空間分布とエネルギー状態を理解することは重要である。本研究 では Ag(110)基板の異方性を利用してこれらの分子の単一配向膜を作製し、PAD 計測を行った。

[実験]

Ag(110)基板上に、膜厚 10 nm 程度の picene 及び Dph-BTBT を蒸着することで試料を作製した。試料の分子配列構造は、走査トンネル顕微鏡(STM)、低速電子線回折(LEED)を用いて観察した。PAD 計測には、分子科学研究所(UVSOR)の BL6U を用いた。計測には hv = 60 eV の放射光を用い、試料-メッシュ電極間に 500 V の電圧を印加して、光電子の取り込み角を拡大した。

[結果]

Fig. 1 (a)に Ag(110)上 picene 多層膜の STM 像を示す。STM 像から、Ag(110)基板の列方向で ある[1-10]方向に沿って、picene 分子が一次元の列構造を形成していることが確認できる。列構造 内部の拡大図からは、picene 分子の長軸が基板の[1-10]方向に沿って配向しており、Ag(110)基板 上では picene 分子の単一配向膜の作製が可能であることがわかった。Fig.1(b)に、picene/Ag(110) のPAD 計測の結果を示す。HOMO と HOMO-1 に対応するエネルギーにおいて、単分子からの PAD の理論計算と概ね一致する強度分布が得られた。各軌道において、もっとも強度が強い部分にお ける EDC を抽出したものを Fig.1(c)に示す。0.2eV 程度の僅差である Picene の HOMO と HOMO-1 でも、明瞭に異なる EDC として確認でき、近接した分子軌道の分離が可能となった。

Fig.2 に、Dph-BTBT/Ag(110)の STM 像と PAD 計測の結果を示す。STM 像では、picene 同様 に、分子長軸が[1-10]方向に単一方向に配向した膜構造が見られた。Dph-BTBT/の場合、HOMO と HOMO-1 の軌道形状が類似しており、PAD は picene ほど大きく異ならないことが予想されて いたが、実験的には HOMO と HOMO-1 のパターンを明瞭に分離することが可能であった。

以上の結果より、これらの実用分子においても、よく規定された単一配向膜を用いることで、 PADの詳細解析が可能となることが示された。



Fig.1(a) STM images of picene/Ag(110). (b) PAD and (c) EDC of HOMO and HOMO-1 of picene.

Fig.2 (a) STM image of Dph-BTBT/Ag(110). (b) PAD of HOMO and HOMO-1 of Dph-BTBT

[1] Y. Kuroda, H. Ishii, S. Yoshino and N. Kobayashi, Jpn. J. Appl. Phys. 58 SIIB27 (2019)