

Dph-BTBT 高配向膜の構造遷移に伴う電子状態の変化

The evolution of electronic structure of Dph-BTBT films during structural transition

1. 筑波大数理 2. 和歌山大

○小野裕太郎¹, 岩澤 珉人¹, 仲間杏², 小田将人², 石井宏幸¹, 佐々木正洋¹, 山田洋一¹

1. Tsukuba Univ., 2. Wakayama Univ.

○Y. Ono¹, M. Iwasawa¹, A. Nakama², M. Oda², H. Ishii¹, M. Sasaki¹, Y. Yamada¹

E-mail: yttriumoxide327@gmail.com

[諸言] BTBT 誘導体は有機半導体分子として知られており、移動度が高いだけでなく強力な分子間相互作用や化学安定性をもつ。このため BTBT は有機電界効果トランジスタ用の p 型有機半導体材料として期待されているが、BTBT 薄膜の電気伝導機構には不明な点が多く残されている。しかしながら、構造、電子物性共に、BTBT の実験的な報告例は未だ少なく、今後の応用に向けた基礎的な理解は十分ではない。そこで本研究では、BTBT 誘導体の一つである Dph-BTBT に着目し、金属基板上に作製した Dph-BTBT 薄膜の基礎物性の理解を目指した。

[実験] 試料は、Ag(111)基板上に、Dph-BTBT を真空蒸着することで分子薄膜として作製した。試料の分子配列構造は、走査トンネル顕微鏡 (STM) および低速電子線回折 (LEED) を用いて観察した。光電子分光計測 (UPS, XPS) には、KEK の PF-BL13b を用いた。

[結果] Fig.1 に Ag(111)基板上に作製した Dph-BTBT 薄膜の STM 像を示す。Dph-BTBT は、蒸着量の増加に伴い、密度の異なる二種類の分子配列構造を形成することがわかった。(a)低密度相では、分子が基板に平面吸着するように配列していると考えられるが、HOMO と LUMO で異なった分子軌道分布が観測されており、基板との強い相互作用による電荷移動が起こっている可能性が示唆された。(b)高密度相では、基板との吸着形態の異なる二つの分子からなる二量体構造を形成していることがわかった。この構造は、単結晶(110)面に類似した構造であり、分子間の相互作用が支配的になることに起因した構造であると考えられる。

Fig.2 に蒸着量ごとに計測した S2p、C1s の XPS スペクトルを示す。低密度層では、基板からの電荷移動により S2p、C1s 共に束縛エネルギーが小さくなっていることが確認された。一方、高密度相に対応する蒸着量 8Å 以上では、基板-分子間の相互作用が弱くなり、中性な S2p、C1s スペクトルに近い結果が得られた。また、UPS 計測では、高密度相の形成に伴う HOMO、HOMO-1 の分裂が見られ、分裂した軌道同士がエネルギー的に重なり合っていることがわかった。このような HOMO、HOMO-1 間のエネルギー的重なりは、BTBT 系分子の優れた伝導機構を理解する上で非常に重要であると考えられる。本公演では、これらの実験結果に加えて、理論計算の結果を踏まえて議論を行う。

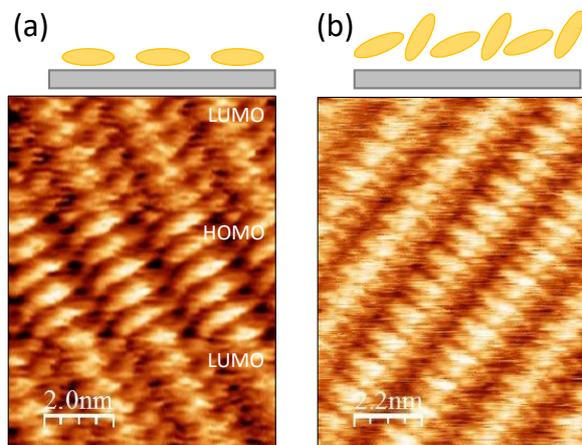


Fig.1 STM image of (a) loosely packed and (b) densely packed Dph-BTBT film / Ag(111)

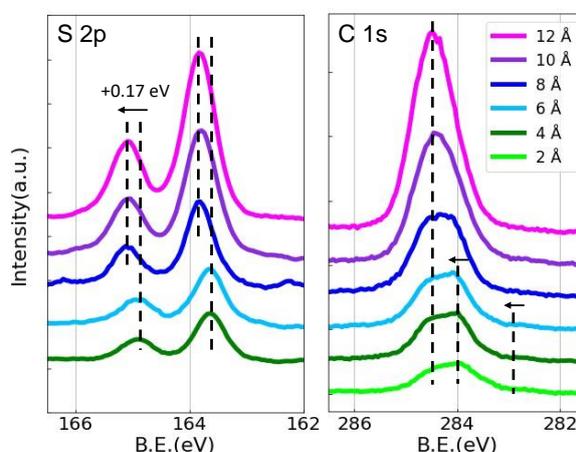


Fig.2 XPS S 2p and C 1s core-level evolutions for Dph-BTBT/Ag(111)