

有機半導体の LUMO バンド構造の実測

Measurement of LUMO Band Structure of Organic Semiconductor

千葉大院融合¹, 千葉大院工², 千葉大 MCRC³ ○(D)佐藤 晴輝¹, (D)折尾 響¹, 吉田 弘幸^{2, 3}

Chiba Univ.^{1,2,3}, °Haruki Sato¹, Hibiki Orio¹, Hiroyuki Yoshida^{2,3}

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

有機半導体では、最高占有準位(HOMO)バンドと最低空準位(LUMO)バンドが、それぞれ正孔と電子の電荷輸送を担う。これまで HOMO のバンド構造 (エネルギーと波数の分散関係) は、エネルギー依存光電子分光法や角度分解光電子分光法により、いくつかの有機半導体について実測され、正孔伝導機構の解明に決定的な役割を果たしてきた[1]。一方、LUMO バンド構造は、適切な実験手法がないために実測されていない。

我々は、低エネルギー逆光電子分光法(LEIPS)を開発し[2]、有機半導体の空準位の精密測定を可能にした。さらに、電子線の指向性を高めるために試料バイアス電圧を用いない低速電子源の開発、徹底した電場と磁場の遮蔽を行うことで、空準位バンド構造の実測を可能にする角度分解 LEIPS(ARLEIPS)を開発してきた[3]。本研究では、有機半導体の LUMO バンド構造の実測に初めて成功したので報告する。

測定試料には、ペンタセンの薄膜相を選択した。シリコン自然酸化膜上にペンタセンを 20 nm 真空蒸着することで試料薄膜を作製した。ARLEIPS は、検出光エネルギー 4.83 eV で電子の入射角度を 0° から 25° まで 5° 刻みで変えて測定した。

測定した ARLEIPS スペクトルを Fig. 1 に示す。赤線はスペクトルの 2 次微分から求めたピーク位置である。この結果から得た LUMO バンド構造を Fig. 2 に示す(赤丸)。本試料は、ペンタセン結晶の c 軸が基板垂直方向に一軸配向した多結晶であるが、明瞭なエネルギー分散が観測された。

この理由を明らかにするため、2 次元強束縛近似から予測されるバンドの方位角方向の強度を積算することで多結晶試料のバンド構造シミュレートしたところ、実験結果をよく再現することがわかった。そこで、最も実験結果をよく再現するように(Fig. 2、ヒートマップ)、移動積分を決定した。また電荷輸送特性を決めるパラメータである有効質量も求めた。

[1] Y. Nakayama *et al.*, J. Mater. Chem. C **8**, 9090 (2020).

[2] H. Yoshida, Chem. Phys. Lett. **539–540**, 180 (2012).

[3] 出田ら, 第 65 回応用物理学会春季学術講演会, G202-12 (2018).

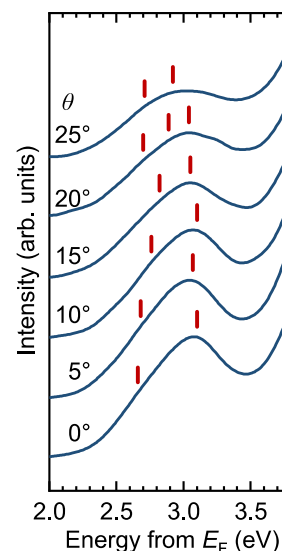


Fig. 1 ARLEIPS spectra of pentacene thin film.

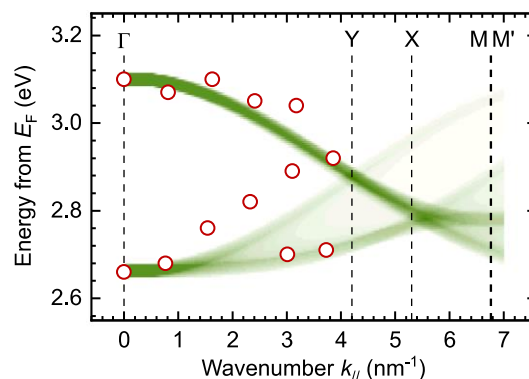


Fig. 2 Experimentally observed LUMO band structure of pentacene by ARLEIPS (open circles) together with the simulated azimuth-angle integrated band structure based on tight-binding approximation (heat map).