

有機単結晶ルブレンの電子構造と電子-分子振動相互作用に関する研究

Investigations on the band structures and couplings of electrons with molecular vibrations in organic single crystal rubrene

分子研¹, 総研大², 千葉大院融合理工学府³, 阪大院基礎工⁴, 筑波大学数理物系⁵

○福谷 圭祐^{1,2}, 村上 雅紀³, 岡上 大二郎⁴, 福井 賢一^{1,4}, 石井 宏幸⁵, 田中 清尚¹, 解良 聡^{1,2,3}

Institute for Molecular Science¹, The Graduate University for Advanced Studies², Graduate School of Science and Engineering, Chiba University³, Osaka University⁴, Tsukuba University⁵

E-mail: kfukutani@ims.ac.jp

有機半導体結晶は、軽く柔軟性のある有機 EL などへの応用が展開され、次世代のエレクトロニクスの根幹を担う材料物質となることが期待されている。しかしながらこのような技術進歩の一方で、これらのデバイスの動作原理の根本を担う有機半導体の電荷輸送機構は、多体相互作用に極めて強い影響を受けるその複雑さから微視的な理解が不十分な中、手探りの応用研究が続けられている。これら有機半導体結晶においては、電子と格子振動 (Phonon) 相互作用はもとより、分子結晶特有の自由度である「電子-分子振動相互作用」の影響が極めて顕著に現れることが指摘されており、基礎的な電子構造の解明に加え、これらの多体相互作用の詳細な理解を進めることにより、応用研究に適切なガイドラインを提供することができると考えられる。

本研究では有機結晶の中でも高い電荷移動度を示すルブレン単結晶[1-3] (Fig. 1a, b 参照) に着目し、主に角度分解光電子分光 (ARPES) を用いて、そのバンド構造の詳細を評価するとともに、電子-分子振動相互作用[4, 5]による電子構造の変調とその異方性を明らかにするための実験を行った。発表では、これまで明らかにされていなかったルブレン単結晶の3次元的なバンド構造と、電子-分子振動相互作用の異方性/等方性を可視化するための広域でのバンド分散測定など (Fig. 1c 参照) について議論する予定である。

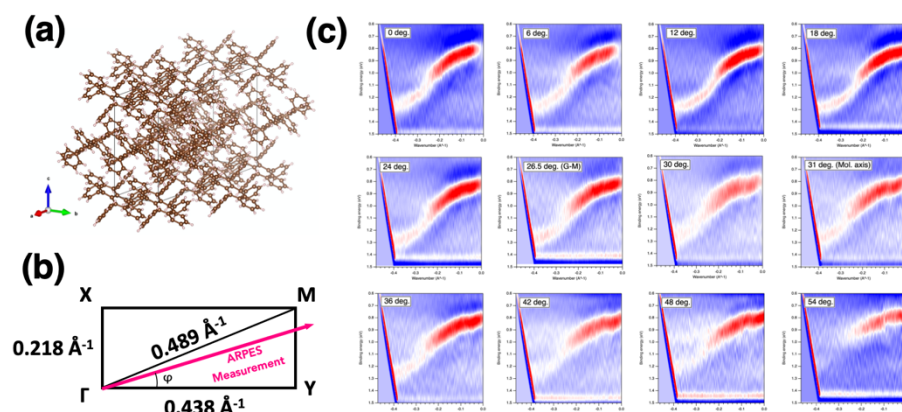


Fig. 1: (a) Crystal structure of rubrene, (b) The surface Brillouin zone of rubrene crystal for bc-plane, (c) Azimuth angle (ϕ) dependence of ARPES data for the HOMO orbital-derived band (second derivative plots).

[1] J. Takeya *et al.*, App. Phys. Lett. **90**, 102120 (2007). [2] D. A. da Silva Filho *et al.*, Adv. Mater. **17**, 1072 (2005). [3] S. Yanagisawa *et al.*, Phys. Rev. B **88**, 115438 (2013). [4] S. Ciuchi *et al.*, Phys. Rev. Lett. **106**, 166403 (2011). [5] F. Bussolotti *et al.*, Nat. Commun. **8**, 173 (2017).