

ARUPS によるルブレ単結晶のバンド分散測定と理論計算との比較

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

¹千葉大院融合理工学府, ²分子科学研究所, ³大阪大院基礎工, ⁴筑波大数理物質系

Band dispersion measurements of rubrene single crystals by ARUPS and comparison with theoretical calculations

○Masaki Murakami¹, Keisuke Fukutani², Daijiro Okaue³, Ken-ichi Fukui^{2,3}, Hiroyuki Ishii⁴
and Satoshi Kera^{1,2*}

¹Graduate School of Science and Engineering, Chiba Univ., ²Institute for Molecular Science, ³Osaka Univ., ⁴Tsukuba Univ.

1. はじめに

近年、有機半導体を使用することで、有機 EL などの軽く、柔軟性のある低コストのデバイスが誕生した。しかしながら、このような技術的進歩の一方で、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の詳細は未解明である。そのため、電荷輸送の一端を担うと考えられる物質のバンド構造を直接観測することができる角度分解紫外光電子分光 (ARUPS) によるバンド分散の実測の研究が進められてきた。

このような有機半導体の中でもルブレ単結晶は、分子性有機半導体の中で高い正孔移動度 (~40cm²/Vs) が報告されており [1]、デバイス応用におけるその重要性から理論・実験両面においてバンド構造解明に向けた精力的な研究が行われてきた [2]。しかしながら、理論計算 [3] と ARUPS の結果の整合性の乏しさなどから、そのバンド構造の詳細について未だに統一見解が得られていない。

本研究では、ルブレ単結晶のバンド構造をこれまでにない精度で測定・決定するため、高品質単結晶を用い、ARUPS によるバンド分散の包括的な測定を行った。

2. 実験方法

使用したルブレ単結晶は物理気層輸送法により作製し、数 μm 程度以下の薄い結晶 (-2mm² 片) を金基板上に転写することで試料を作製した。

マイクロチャンネルプレート低速電子線回折 (MCP-LEED) で回折像を測定し結晶方向を決定し、その場で HeII 光源により ARUPS 測定を行った。測定はすべて室温にて行った。

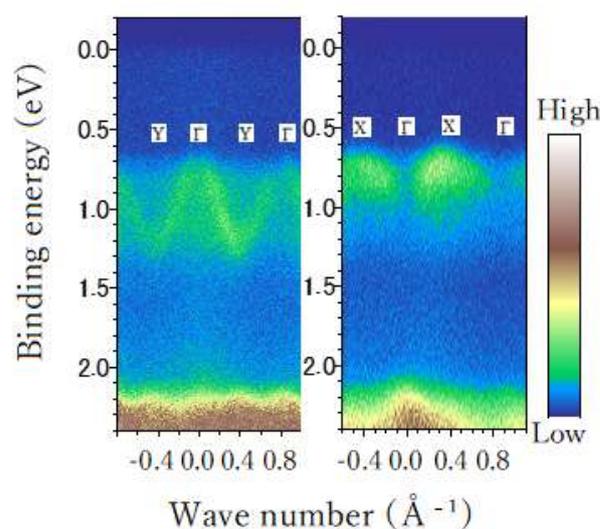


Fig.1.ルブレ単結晶 Γ -Y 方向 (左) と Γ -X 方向 (右) の ARUPS の E-k マップ

3. 結果と考察

Fig.1 は MCP-LEED で決定した結晶方向をもとにルブレ単結晶を ARUPS で測定した E-k マップである。先行研究で観測されていた Γ -Y 方向だけでなく Γ -X 方向でもバンド分散の観測に成功した。また、 Γ -X 方向では Γ 点が最低ギャップエネルギーを決めないことが実証された。講演では理論計算との相違やバンド形状についての考察などについて詳細を報告する。

文 献

- [1] J. Takeya, *et al.*, Appl. Phys. Lett. **90**, 102120 (2007).
- [2] F. Bussolotti, *et al.*, Nat Commun **8**, 173 (2017).
- [3] X. Wang *et al.*, Cryst. Eng. Commn. **18**, 7353 (2016).

*E-mail: kera@ims.ac.jp