Ag(110)基板上に配向した π 共役系分子薄膜(DBP)の電子状態○大瀧 峻也¹, 福谷 圭祐², 解良 聡^{1,2*}¹千葉大院融合理工学府, ²分子科学研究所Electronic states of thin films of π -conjugated molecule DBP oriented on Ag(110) substrate○Shunya Otaki¹, Keisuke Fukutani², and Satoshi Kera^{1,2*}¹Graduate school of Science and Engineering, Chiba Univ., ²Institute for Molecular Science

1. 序論

有機デバイスにおいて、金属電極から分子への電荷注入機構はデバイスの電荷輸送や変換効率に大きな影響を及ぼす。しかし多くの場合、その界面構造が複雑であるため、電子状態の変化に対する構造との相関が整理されておらず、未解明の部分が多い。そのため有機デバイスの性能向上に向けて、有機分子薄膜と基板界面について、エネルギー的接合のみならず空間的な波動関数接続の微視的な理解は大変重要である。

Tetraphenyldibenzoperiflanthene(DBP)は、ホール伝導度の高い安定なp型半導体として注目を集めている。加えてこの分子は、巨大な π 共役平面を持ちながらも側鎖フェニル基による立体障害により、基板と主鎖間の距離が大きくなることが想定される。以上のことから、DBPと基板界面でどのような波動関数接続により電子状態が変化し、界面エネルギー準位接合を満たすのか興味深い。また先行研究により、この分子膜をAg(111)基板上に成膜すると、界面由来と考えられる新たな準位が観測されることが分かっているが、この準位の起源について未だ詳しい議論はなされていない[1]。そこで本研究では、Ag(110)基板上にDBP分子の単層膜を作製し、分子配向や表面および界面の電子状態について、準安定励起原子電子分光法(MAES)と角度分解紫外光電子分光(ARUPS)における光電子放出の角度分布に着目し詳細に研究を行った。

2. 実験方法

Ag(110)基板は、スパッタアニールサイクルにより清浄面を得た。DBP粉末の入った坩堝を加熱し、真空蒸着により、単層膜を作製した。最表面の電子状態が観測可能なMAES(He²⁺23S)とUPS(HeI)の膜厚依存性を同

Fig. 1 UPS、MAES スペクトル (単層膜付近、多層膜) 一試料について評価した。蒸着、測定は全て室温にて行った。

3. 実験結果

Fig. 1 に清浄基板と単層膜付近、多層膜におけるUPS、MAESの膜厚依存性を示す。仕事関数の飽和より、0.20 nmを一層とした。UPSでは0.20 nm、0.30 nmにおいて(A)1.3 eV 付近に準位が観測された。多層膜(1.50 nm)のUPSでは、界面由来でない分子のHOMOが(B)1.9 eV 付近に観測されたことから界面特有のギャップ準位であると言える。一方MAESでは、UPS(A)に対応する界面準位が1.4 eVに観測される。さらに単層0.20 nmでのみ(C)0.2 eV 付近に準位が観測された。一般的に金属表面におけるMAESでは共鳴イオン化過程によりフェルミ端の構造は観測されない。実際にC準位は清浄基板と0.30 nm以上の膜厚では観測されず、この準位は特定の膜厚での界面電子状態変化を敏感に反映していることが示唆される。つまり基板電子と分子軌道の弱い混成により、界面に局在化した電子状態がMAESで特徴的に検出されたと考えられる。

当日はARUPSの結果も踏まえ、より詳細にこの界面準位の起源について議論を行う。

参照

[1]白石龍 ほか、第64回応用物理学会春季学術講演会

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