

フッ化ペンタセンの電子状態と正孔-分子振動結合

○細海俊介¹、深川弘彦¹、片岡隆史¹、永松伸一¹、阪元洋一²、鈴木敏泰²、解良聡¹、上野信雄¹
千葉大学大学院自然科学研究科¹、分子科学研究所²

有機分子固体中の電子、正孔の伝導機構については多くが未解決であり有機デバイス動作効率の向上のためにも重要な研究対象である。電荷-分子振動結合は、分子間トランスファー結合とともにホッピング伝導の支配要素であることが知られている。有機固体中は多数のドメインバウンダリを持っていると考えられ、ホッピング伝導は重要な伝導機構である。既にペンタセン(PEN)の正孔-分子振動結合は解明されている[1]。固相での有機分子の正孔-分子振動結合について更なる理解を深めるために本研究では、フッ素置換により n 型的挙動を示すことが報告されているフッ化ペンタセン(PFP)[2]について正孔-分子振動結合の観測を試みた。さらに、PEN についても新たに多重モード解析を行い比較することで、フッ素置換による正孔-分子振動結合の変化を調べた。

清浄化したグラファイト基板上に PFP を蒸着し、アニール(373K)を行って単分子膜を作成した。紫外光電子分光法(UPS)により冷却(55K)した試料に対して電子状態の測定を行った。PEN は以前我々のグループにより行った測定結果[1]を用いた。

Fig.1 に PEN と PFP の単分子膜(55K)の UPS(HOMO 領域)とその解析結果を示す。フィッティングは、イオン化による原子の平衡位置の変化(フランクコンドン近似)から求めた正孔-分子振動結合を基にガウス関数で展開した[3]。解析結果からわかる最も正孔-分子振動結合が強い 4 つの 0-1 遷移ピークを図中に示した。いずれの分子においても複数の振動モードが結合することで、HOMO バンドが形成されている。このうち、正孔-分子振動結合が強く観測されている振動モードは PEN では C-H のベンディング、PFP では C-F のストレッチングであった。フィッティングによる解析の結果、PFP の Reorganization energy(λ)は 288meV で PFP より約 2.4 倍大きいことがわかった。よって、PFP の方がホッピング伝導ではモビリティがより遅いと考えられる。

[1]H. Yamane, et al., Phys. Rev. B 15 (2005) 153412

[2]Y. Sakamoto, et. al., J. Am. Chem. Soc. 126 (2004) 8138

[3]J.-L. Bredas, et. al, Chem. Rev., 104 (2004) 4971

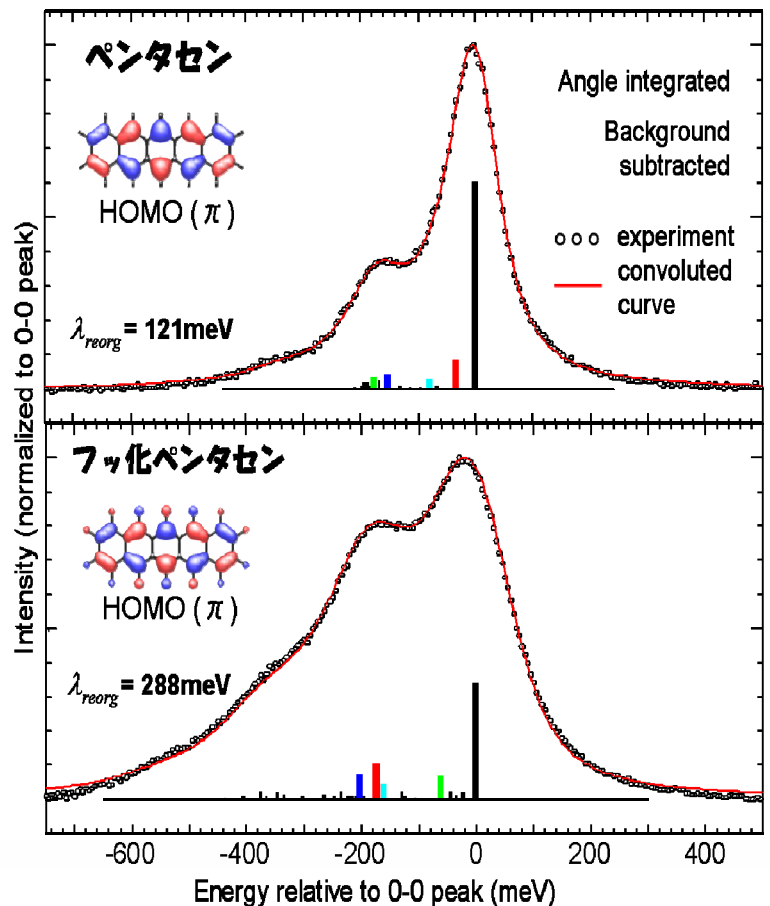


Fig.1 HOPG 基板上の pentacene(PEN) と perfluoropentacene(PFP) の UPS 結果の HOMO 領域。複数の振動モードで解析を行った結果。