

マルチスケールシミュレーションによるアモルファス有機半導体の低エネルギー逆光電子スペクトルの再現

Multiscale simulation to reproduce low-energy inverse photoelectron spectra of amorphous organic semiconductor films

千葉大工¹, Eindhoven University of Technology² 千葉大院工³, 千葉大 MCRC⁴,

○(B)長岡旺汰¹, Björn Baumeier², Reinder Coehoorn², 吉田弘幸^{3,4}

Chiba University^{1,3,4}, Eindhoven University of Technology²

○Ota Nagaoka¹, Björn Baumeier², Reinder Coehoorn², Hiroyuki Yoshida^{3,4}

E-mail: 21t1248z@student.gs.chiba-u.jp

有機半導体の空準位は、低エネルギー逆光電子分光法 (LEIPS) により直接的に観測される[1]。一方、理論的には、単分子の電子構造が分極エネルギーなどの固体効果により摂動を受けたものとして計算することができる。しかし、有機 EL 素子で広く使われるアモルファス性有機半導体の場合は、X 線単結晶構造が利用できないなど固体の構造が不明であり計算も困難であった。本研究では、アモルファス性有機半導体 α -MADN と β -MADN について、マルチスケールシミュレーションによって LEIPS スペクトルの再現を行い、これに基づいて LEIPS スペクトルから断熱電子親和力を正確に求める方法を考察した。

α -MADN と β -MADN を ITO 基板上に速度 1 nm min^{-1} で真空蒸着することで、膜厚 10 nm 、 15 nm の薄膜を作製した。LEIPS では、自由電子が空準位に遷移するときの発光を検出する。微弱光検出の際に、電子線による励起状態からの発光が測定を妨害する[2]。 α -MADN と β -MADN はどちらも 370 nm ~ 550 nm で蛍光を発生することから、可視域に感度を持たない光電子倍增管 R821 を用いた。バンドパスフィルターには中心波長 260 nm と 285 nm を用いた。シミュレーションでは、多体系グリーン関数理論を用いて単分子の振電エネルギーを計算した。アモルファス構造は、 770 個の分子を膜厚 8 nm で $10\text{ nm} \times 10\text{ nm}$ 周期境界条件を取り入れたスラブについて計算した。その後、深さに依存した分極効果を取り込んで、固体のスペクトルを再現した。

Fig. 1 に α -MADN の LEIPS スペクトルを示す。電子親和力は、スペクトルの立ち上がりに直線を引いてベースラインとの交点として求めた。また、LEIPS スペクトルには、肩構造が見られたことから、2 次微分の極小値からピーク位置を決めた。Fig. 2 にシミュレーション結果を示す。赤線は LUMO、緑は縮退した LUMO+1 と LUMO+2、これより高い空準位は黒線で示した。これらをすべて足し合わせたものが灰色の実線である。これに、装置関数を半値幅 0.3 eV のガウス関数と仮定して畳み込むことで再度計算したスペクトルが青色の曲線となる。

Table 1 に実験とシミュレーションから求めたスペクトルの立ち上がり、ピーク位置をまとめた。実験値と計算値はよい一致を示している。これらの結果を基に、電子親和力の決定方法、測定分解能の影響、断熱電子親和力を求める方法について、議論する。

1. H. Yoshida, Chem. Phys. Lett. 539-540, 180 (2012).
2. A. Akatsuka, M. Miura, G. Kapil, S. Hayase, H. Yoshida, Appl. Phys. Lett. 124, 241603 (2024).

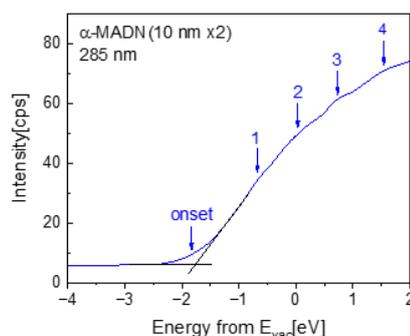


Figure 1: Spectra of LEIPS for α -MADN

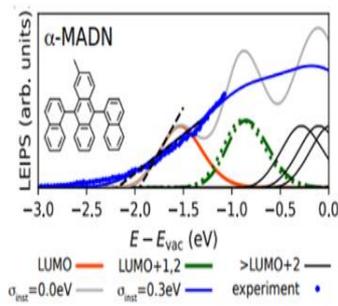


Figure 2: Spectra of multiscale simulation for α -MADN

Table 1: Onset and peak position in experiment and simulation

	実験		計算
	バンドパスフィルター (nm)		
	285	260	
Onset (eV)	-1.87	-1.91	-1.95
Peak1 (eV)	-0.68	-0.55	-0.89
Peak2 (eV)	0.03	0.01	-0.12