

## 真空蒸着したペンタセンの薄膜相における分子配向測定

**Molecular orientation of the thin film phases of vacuum evaporated pentacene on various substrates.**

高倉 亮<sup>a</sup>, 布瀬 暁志<sup>a</sup>, 望月 雄太<sup>b</sup>, 奥崎 秀典<sup>b</sup>, 滝沢 優<sup>c</sup>, 難波 秀利<sup>d</sup>  
Ryo Takakura<sup>a</sup>, Takashi Fuse<sup>a</sup>, Yuta Mochizuki<sup>b</sup>, Hidenori Okuzaki<sup>b</sup>, Masaru Takizawa<sup>c</sup>,  
Hidetoshi Namba<sup>d</sup>

<sup>a</sup>東京エレクトロン(株), <sup>b</sup>山梨大学大学院医学工学総合教育部, <sup>c</sup>立命館大学総合科学技術研究機構,  
<sup>d</sup>立命館大学理工学部物理学科

<sup>a</sup>Tokyo Electron Limited, <sup>b</sup>Interdisciplinary Graduate School of Medicine and Engineering, University of Yamanashi, <sup>c</sup>Research Organization of Science and Technology, Ritsumeikan University, <sup>d</sup>Department of Physical Sciences, College of Science and Engineering, Ritsumeikan University

アモルファス SrTiO<sub>3</sub> 基板上的ペンタセンの分子配向を調べるため、吸収端近傍 X 線吸収端微細構造の偏光依存性測定を行った。アモルファス SrTiO<sub>3</sub> 基板上においてペンタセン分子は垂直配向していることが分かった。また、SrTiO<sub>3</sub> 基板を面内回転させて測定した結果、蒸着膜におけるペンタセンの分子配向は等方的であることが分かった。

Near-edge X-ray absorption fine structure measurements were performed on pentacene films on amorphous SrTiO<sub>3</sub> substrates in order to investigate the molecular orientation. We found that the pentacene molecules are aligned vertically on the amorphous SrTiO<sub>3</sub> substrate. We also found that the molecular orientation of the pentacene of the lateral direction is isotropic distributed as a result of azimuth rotation measurement for SrTiO<sub>3</sub> substrate.

**Keywords:** ペンタセン, グレイン, 吸収端近傍 X 線吸収端微細構造

**背景と研究目的:** 有機半導体を用いた有機薄膜トランジスタは、軽量・大面積・フレキシブル等の特徴から電子ペーパーやフレキシブルディスプレイへの応用が期待されている。

現在多くの有機半導体が開発・研究されているが、中でもペンタセンはアモルファスシリコンと同程度のホール移動度 (~1cm<sup>2</sup>/Vs) を有し、幅広く研究されている。ペンタセンは、真空蒸着法により容易に良質な薄膜が得られることから多くの研究がおこなわれている。真空蒸着法において、ペンタセンは基板上に核形成後、デンドライト成長し、グレインを形成する(Fig.1.(a))。一般に、デンドライト成長した多数のグレインからなる薄膜は、分子配向が等方的であると推測される。

本研究では、アモルファス SrTiO<sub>3</sub> 上にペンタセンを蒸着成膜し、これを吸収端近傍 X 線吸収微細構造(NEXAFS)で測定することにより、ペンタセンのグレイン内部での面内配向依存性を明らかにすることを目的とする。面内に配向性が存在すると、トランジスタ形成の際チャンネル形成方向を考慮する必要がある

からである。また、本研究においてペンタセン結晶の面内依存性の有無を明らかにし、トランジスタ形成のための指針を得ることを目的とする。

**実験:** ペンタセン薄膜は、アモルファス SrTiO<sub>3</sub>膜上に抵抗加熱蒸着法により室温で成膜した。成膜レートは0.4[Å/sec]に設定し、膜厚3[nm]の薄膜(Fig.1.(b))を作製した。

NEXAFS測定は、立命館大学SRセンター BL-8でおこなった[1]。C-K吸収端NEXAFSスペクトルは、表面近傍の配向性に注目するために、部分電子収量法で得た。阻止電圧は-150[V]に設定した。試料面内でのペンタセン分子配向異方性を調べるため、同一の試料を面内方向に回転(0°,30°,45°,60°,90°)させ、試料垂直方向に対する放射光の入射角を変化(0°,±30°,±60°)させて偏光依存スペクトルを取得した。

**結果、および、考察:** Fig.2 に試料回転角 0°、Fig.3 に試料回転角 90°のC-K吸収端NEXAFS

測定の結果を示す。これらのピークはC 1sからπ\*への遷移である。入射角を大きくするとこれらのピークは減少した。すなわち、ペンタセン分子はアモルファスSrTiO<sub>3</sub>基板に対して分子のc軸方向に直立して配向していることを示している。

一般に、絶縁膜上においてペンタセンは c 軸配向し、結晶多形は薄膜相(tilt 角:17.1°)とバルク相(tilt 角:25.2°)をとることが知られている[2]。

各試料回転角(0°,30°,45°,60°,90°)から得られたスペクトルより、分子の傾き (tilt 角) を議論するため、次式を用いた。

$$\frac{I(\theta)}{I(0^\circ)} = \frac{P \sin^2 \theta + \left(\frac{1}{2} - \frac{3}{2} P \sin^2 \theta\right) P \sin^2 \alpha}{\frac{1}{2} P \sin^2 \alpha}$$

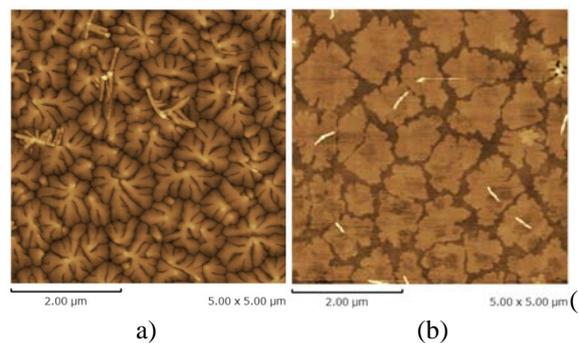
ここでθは入射角、Pは偏光因子、αはπ\*軌道の極角である[3]。上式を用い、入射角に対するこれらのピーク強度の変化の割合を求めたところ、試料回転角 0°と 90°ではほぼ同じ結果が得られた。このことより、試料回転角 0°と 90°では、分子の面内配向はほぼ等しいことが分かった。同様に、試料回転角 30°、45°、60°についてもほぼ同様の結果が得られた。

これらの結果より、蒸着法により形成したペンタセンの面内分子配向は、グレイン形成初期段階において等方的であることが分かった。

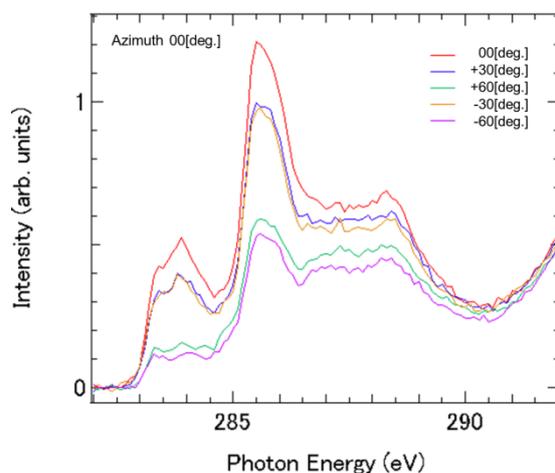
ペンタセンは、そのグレイン形成初期段階においてウェット層を形成することが知られている[4]。ペンタセンの一層目は基板に対して ab 軸 (水平) 配向しており、二層目から c 軸 (垂直) 配向する。今回用いたペンタセンの膜厚は 3nm であり、ウェット層の上 1~2 分子層程度の薄膜相を測定した結果であり、ウェット層より上層の分子配向は面内で異方性は無いことが分かった。

### 文 献

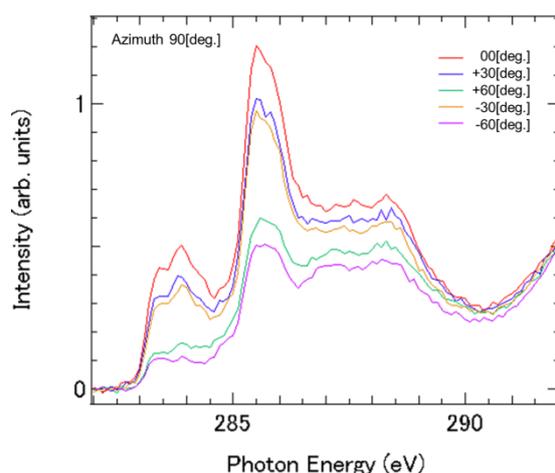
- [1] H. Namba *et al.*, J. Synchrotron Rad. **5**, 557(1998).
- [2] D. Knipp *et al.*, J. Appl. Phys. **93**, 347(2003).
- [3] J. Stöhr, *NEXAFS Spectroscopy* (Springer, New York, 1992).
- [4] F. -J. Meyer zu Heringdorf *et al.*, Appl. Phys. A **78**, 787(2003).



**Fig. 1.** AFM images of (a) 30nm thick and (b) 3nm thick pentacene thin films on the amorphous SrTiO<sub>3</sub> substrates.



**Fig. 2.** Incident angle dependence of NEXAFS spectra for the pentacene thin film (3nm) on the amorphous SrTiO<sub>3</sub> substrates at 0deg of azimuth angle.



**Fig. 3.** Incident angle dependence of NEXAFS spectra for the pentacene thin film (3nm) on the amorphous SrTiO<sub>3</sub> substrates at 90deg of azimuth angle.