## 有機分子単層膜の電子状態

角田 治哉,1 平原 徹,2 松田 巌,2 長尾 忠昭,3 長谷川 修司,2 上野 信雄,4 〇坂本 一之4

1 千葉大学大学院自然科学研究科

² 東京大学大学院理学系研究科

## <sup>3</sup>物質·材料研究機構

## 4 千葉大学大学院融合科学研究科

ペンタセン(Pn)を用いたデバイスの性能向上や新機能デバイスの開発には、Pn 薄膜・固体内での電荷 移動のメカニズムを解明する必要がある。このメカニズムの解明には Pn の電子構造の理解が不可欠で あり、これまで主に理論計算[1,2]によって研究されてきた結果、HOMOのバンド分散に大きな異方性が あるとされた。この HOMO のバンド構造がデバイス機能として興味深い電荷移動度の異方性を示唆す るにもかかわらず、高品質の Pn 薄膜・固体の作成が困難であることから実験的にこれを検証した例は

ない。近年、Bi(001)表面上に Pn 分子を蒸着することにより分子 の長軸を基板に対してほぼ垂直に向けた高品質の Pn 単結晶膜が 作成可能であることが報告された[3]。そこで我々は、Bi(001)表面 上に Pn 1 分子層の超薄膜を作成し、ARPES を用いて異なる 3 つ の対称軸(Γ-Y、Γ-X、Γ-M)に沿って電子構造を測定した。図 1 は **Γ-Y** 方向の ARPES スペクトルである。Fermi 準位から EB~0.9 eVの範囲に観測される構造は基板のBi由来のものであり、EB~ 1.0 から 1.8 eV の範囲に観測される構造は Pn の HOMO 由来であ る。HOMO 由来の構造の形状より HOMO 領域に 2 つのバンドが 存在することがわかる。HOMO領域に2つのバンドが存在するの は、単位格子内に2つのPn分子が存在するためであり、理論的に 予測されていた2つのバンドを今回我々が初めて観測した。図に 示すような fitting より得た θe に依存した 2 つの HOMO バンドの 分散を太線で示す。その結果、Γ-Y 方向において 2本の HOMO バンドのうち、低束縛エネルギー側のものはほとんど分散しない が、高束縛エネルギー側のものは 210 ±40 meV の分散を有するこ とがわかる。

本講演では他の2方向での測定結果も示して理論計算の結果と 比較することで Pn 超薄膜の電子構造について述べるとともに、一 次元金属的な電子状態を有する In/Si(111)-(4×1)表面上に吸着し た C60を例として、異方性を持った有機分子薄膜の成長様式に関 しても述べる。



## 参考文献

- [1] G. A. de Wijs, C. C. Mattheus, R. A. de Groot, T. T. M. Palstra, Synth. Met. 139, 109 (2003).
- [2] M. L. Tiago, J. E. Northrup, and S. G. Louie, Phys. Rev. B 67, 115212 (2003).
- [3] J. T. Sadowski, T. Nagao, S. Yaginuma, Y. Fujikawa, A. Al-Mahboob, K. Nakajima, T. Sakurai, G. E. Thayer, and R. M. Tromp, Appl. Phys. Lett. 86, 073109 (2005).