

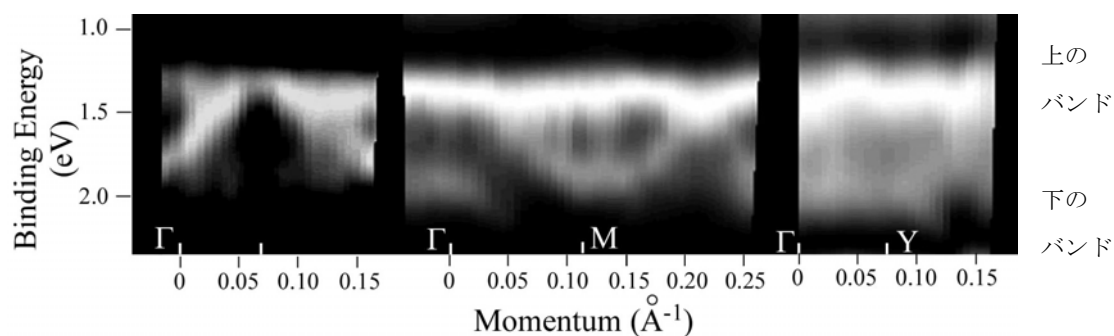
有機半導体の電子状態 — 格子振動とスピンに関連して  
～薄膜相ペンタセンの配向エピタキシャル成長とバンド構造の温度依存性～

東京大学理学系化学専攻 島田敏宏  
shimada@chem.s.u-tokyo.ac.jp

ペンタセンは薄膜状態で移動度が高い有機半導体として、実用に向けて活発な研究が行われている。光電子分光によってバンド分散を調べる研究は多数行われており、最近ではバンド分散の温度依存性測定により低温でのバンド伝導と高温でのホッピング伝導の移り変わりを調べることができることが指摘され、いくつかのグループが測定を開始している。

バンド分散を角度分解光電子分光で調べるには、単結晶試料が必要になるが、適切なドーピング法が開発されていない現状ではチャージアップの問題があり、また表面清浄化の問題もあるため大面積バルク単結晶が得られても測定は困難である。そこで、我々はエピタキシャル成長によるペンタセンの単結晶薄膜作製を試みた。

ペンタセンのエピタキシャル成長はいろいろな基板上で知られているが、基板表面の対称性がペンタセン格子の対称性に比べて高いため、エピタキシャル膜といってもいくつかの配向が共存したものになってしまう。そこで、周期的なステップを導入することにより基板表面の対称性を落として成長させることを試みた。さらに、表面のダングリングボンドはエピタキシャル成長の妨げになるので、異種原子修飾により不活性させる必要がある。 $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Bi 終端した Si(111)はこの目的に好適であることを見出し、 $3.5^\circ$  ずれた双晶のみを含む薄膜相の擬似単一配向膜を得ることができた。この試料の角度分解光電子分光により HOMO のバンド分散を得た。2つに分裂した後の上のバンドについて、130K(下図)では各方向に分散が見られたが、300Kでは $\Gamma$ Y、 $\Gamma$ M 方向の分散がなくなって平らになっていることが見出された。これは低温でのバンド伝導が分子間振動の影響でホッピング伝導に移り変わっていること、およびその効果に異方性があることを示している。このような情報が、高移動度有機半導体の分子設計に役立つことを期待したい。



図：薄膜相ペンタセン単分子層膜のバンド分散(130K)