

表面 X 線回折法による有機半導体の電子密度解析

若林裕助¹, 竹谷純一², 木村剛^{1,1} 阪大基礎工,²阪大理

有機半導体は安価，軽量なデバイス素材として期待されており，実際に有機 EL ディスプレイなどで既に実用化されている。このような有機半導体でトランジスタを作製した場合，表面近傍数ナノメートルを電気が流れる事が知られていたが，これだけ表面に近い領域では構造緩和が起こっていると期待される。構造が変わっていれば分子軌道，及び隣接分子との重なり積分など物性に直結するパラメタに影響が及ぶものの，表面緩和によって分子がどのように歪んでいるかの測定に成功した例がこれまでなかった。

我々は最も高い性能を持つ有機半導体素材であるルブレン単結晶に対して BL-4C で表面 X 線回折実験を行い[1]，さらに最近発展してきた解析法である Coherent Bragg rod analysis[2]を適用する事で図に示したような表面近傍の電子密度を得ることに成功した。試料外側では電子密度がほぼ0であるのに対し，試料内側では分子の形状に合わせて6つの電子密度の極大が観測された。この電子密度分布より，表面第一層の分子は高さの分布も結晶内側の分子より大きく，また分子形状も変形している事が明らかになった。

さらに，得られた構造から分子軌道計算を行う事で，HOMO のエネルギーレベルが表面第一層のみ 0.1eV も変化している可能性が示された。

[1] Y.Wakabayashi *et al.* Phys. Rev. Lett., in pres.

[2] M.Sowwan *et al.*, Phys. Rev. B **66** 205311 (2002).

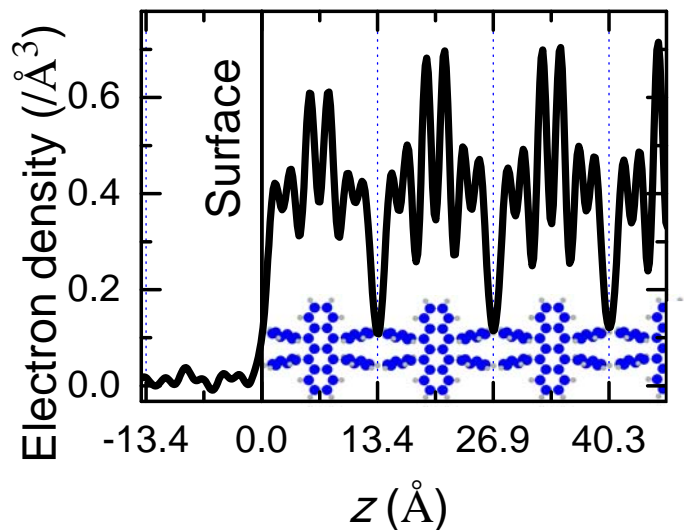


Fig. 実験的に得られたルブレン単結晶の表面近傍における電子密度分布