

ペンタセン face-on 配向相の発見

Finding of the Face-on Phase in a Pentacene Thin Film

京大化研¹, 神戸大院理², [○]塩谷 暢貴¹, マーディー リチャード¹, 枝 和男², 下赤 卓史¹,
長谷川 健¹

Kyoto Univ.¹, Kobe Univ.², [○]Nobutaka Shioya¹, Richard Murdey¹, Kazuo Eda², Takafumi Shimoaka¹,
Takeshi Hasegawa¹

E-mail: nobutaka@env.kuicr.kyoto-u.ac.jp

剛直な縮環構造からなるペンタセンは、有機薄膜トランジスタの最も標準的な素子材料の1つとして、その薄膜構造から電子物性まで広く研究されている。それによると、ペンタセン分子は薄膜中でバルクと異なる薄膜特有の結晶構造（“薄膜相”）をとること、および薄膜中でその分子軸が基板に対して垂直に立つことがよく知られている。また、いくつかの研究グループは基板温度を低温にした状態で製膜を行うと、基板上でペンタセン分子の拡散距離が短くなり、完全に秩序性のない“非晶質相”が形成されることをX線回折などの結果から示している[1]。しかし、別のグループは、同様にして作製した薄膜の可視吸収スペクトルの測定から、少なくともオリゴマー程度の秩序性を有することを示している[2]。このように、低温蒸着膜中でのペンタセンの分子構造に関する研究は長い間決着がついておらず、その分子パッキングおよび分子配向は未解明であった。

本研究では、赤外および可視域での多角入射分解分光法（pMAIRS）[3]と微小角入射X線回折（GIXD）を用いて、基板の面内および面外方向に対する構造異方性に着目した解析を行うことで、ペンタセン低温蒸着膜の構造を明らかにした。その結果、1) 薄膜相と非晶質相との間に中間相が存在することをはじめて発見し、2) その中間相では、ペンタセン分子はface-on配向をとることを実験的にはじめて観測した。これは、ペンタセン低温蒸着膜が非晶質相からなるという従来のモデルを覆す。加えて、これまでペンタセンのface-on配向は基板に金属の単結晶や高配向性熱分解グラファイト（HOPG）を用いることでのみ実現されてきたが、本研究ではじめて不活性基板上のペンタセン分子のface-on配向を観測できたことも重要である。

References

- [1] (a) Kamura, Y.; Shirotani, I.; Inokuchi, H.; Maruyama, Y. *Chem. Lett.* **1974**, 3, 627. (b) Lee, K. O.; Gan, T. T. *Chem. Phys. Lett.* **1977**, 51, 120.
- [2] (a) Hesse, R.; Hofberger, W.; Bässler, H. *Chem. Phys.* **1980**, 49, 201. (b) Eiermann, R.; Parkinson, G. M.; Bässler, H.; Thomas, J. M. *J. Phys. Chem.* **1983**, 87, 544.
- [3] (a) Hasegawa, *Anal. Chem.* **2007**, 79, 4385. (b) Hasegawa, T.; Itoh, Y.; Kasuya, A. *Anal. Chem.* **2008**, 80, 5630.