

Si(100)-2×1 表面上の縮合多環芳香族炭化水素の吸着構造

(CREST¹・東北大通研²) ○細井宜伸^{1,2}・岡村康史²・濱裕之²・
木村康男²・石井久夫²・庭野道夫²

【序】近年、有機 EL 素子に代表される機能性有機分子を用いた素子開発が盛んに進められている。有機分子を用いた素子の開発を進めるに当たり、すでに確立したシリコンの微細加工等の技術を用いることは非常に有益である。機能性有機分子とシリコンテクノロジーの融合を実現するためには Si 基板上における有機分子の吸着、及び薄膜成長の過程を詳細に理解し、分子を基板上に制御して集積する必要であり、そこで現在、我々は縮合多環芳香族炭化水素の Si(100)-2x1 表面への吸着構造について系統的な解析を進めている。縮合芳香族炭化水素は興味深い電子、光学的性質を有し、様々な有機分子素子への展開が期待されている。例えばペンタセンは電界効果トランジスタへの応用が盛んに研究されており[1]、またペリレンとその誘導体では、他の有機分子及び高分子とヘテロ接合を作成し、太陽電池等への応用が進められている[2]。我々は多重内部反射(multiple internal reflection ;MIR)型赤外吸収分光による分子振動の解析から、このような縮合芳香族炭化水素の Si 表面における吸着構造を明らかにした。MIR 法では Si 基板をプリズムとして用い、サンプル内で赤外光を多数回内部反射させることで高感度に測定できるため、単分子膜以下の測定が可能であり、これまでに Si 表面に吸着したベンゼンについて詳細に解析した実績がある[3]。今回の発表ではこの MIR 法により明らかになった直線状に縮合したナフタレン、ペンタセン及び平面状に縮合したペリレンの吸着構造について報告する。

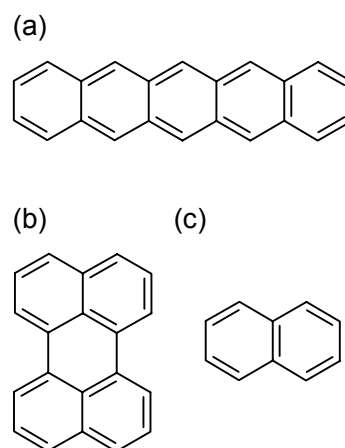


図 1 (a) ペンタセン、(b) ペリレン、(c) ナフタレン

【実験】実験は試料作成から測定まですべて超高真空槽にて行った。Si(100)-2x1 表面は真空導入前の RCA 洗浄と超高真空中での熱処理より作成した。有機分子の吸着はナフタレンの場合は加熱により昇華した分子をバリアブルリークバルブにより導入し、ペンタセン、ペリレンの場合はガラスセルより真空蒸着にて行われた。MIR 測定は FT-IR 分光器からの赤外光を CaF₂ 窓より真空槽に導入し、基板にて多重内部反射させた後、InSb 検知器に集光することで行われた。

【結果及び考察】我々ははじめにもっとも単純な縮合芳香族炭化水素でベンゼン環が二つ縮合したナフタレンの吸着構造を調べた[4]。図 2 は MIR 法によって測定された赤外スペクトルである。低被覆率のスペクトル(図 2(a))では 3050 cm⁻¹、2950 cm⁻¹ 付近のそれぞれピークが観測された。通常、バルク固体のナフタレンでは sp² の CH のみが存在するので、2950 cm⁻¹ 付近にはピークは観測されない。しかしながら Si(100)-2x1 表面では、表面に存在するダングリングボンドとσ結合をつくるため、本来現れるはずのない sp³ の CH 由来の伸縮振動が 2950 cm⁻¹ 付近に観測されたと考えられ

る。我々は密度汎関数法から図 3 に示す安定な Si 表面上のナフタレンの吸着構造を提案し、この構造から計算できる基準振動が観測されたスペクトルと一致していることを確認した。また高被覆率のスペクトル(図 2(b))においては、図 3 の吸着構造由来のピーク強度の減少や新たなピークの出現が観測され、多数のナフタレン吸着構造が共存していると考えられる。

次に実用素子への応用が期待できる分子である、ナフタレンをさらに直線的にベンゼン環の縮合を増やしたペンタセンと平面的な縮合体であるペリレンの Si 表面への吸着を調べた。その結果、ペンタセン単分子膜のスペクトルではナフタレンと同じように sp^3 のピークが観測され、Si 表面のダングリングボンドと結合し、分子構造が歪んでいることがわかったが、ペリレンでは sp^2 領域にブロードなバンドが観測されただけで、 sp^3 に由来する CH 伸縮振動に帰属されるような明瞭なピークは観測されなかった。ダングリングボンドと結合することで平面が歪むために、平面的に広がったペリレンでは分子内に sp^3 の炭素を包含することが難しいと考えられる。

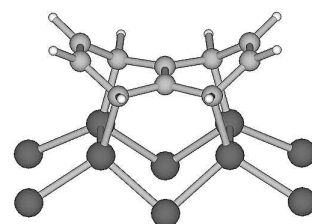


図 3 Si(100)-(2x1)表面のナフタレン吸着構造

【結論】本研究では Si(100)-2x1 表面における三種類の縮合多環芳香族炭化水素の吸着構造を明らかにした。今後、さらに巨大なコロネンなどの分子の吸着構造について検討し、また他の測定手法を用いて、相補的な研究を展開していく予定である。

【参考文献】 [1] D. J. Gundlach, Y. Y. Lin, T. N. Jackson, S. F. Nelson, D. G. Schlom, IEEE Electron Device Lett., 18 (1997) 87. [2] C. W. Tang, Appl. Phys. Lett., 48 (1986) 183. [3] 渡辺、篠原、木村、斎藤、庭野, 表面科学, 24 (2003) 98. [4] 岡村、木村、石井、庭野, 表面科学, *in press*.

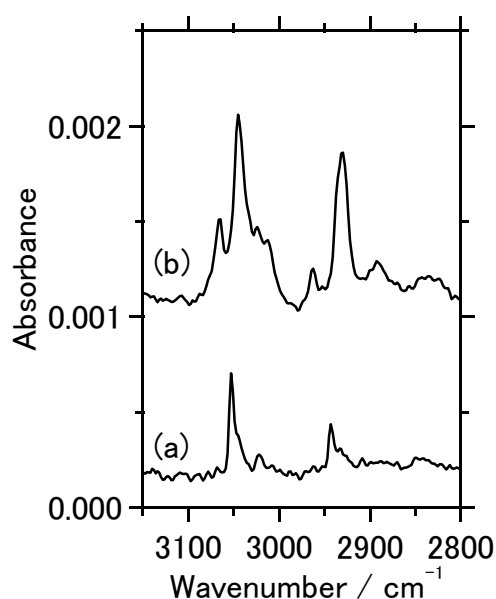


図 2 (a) 低被覆率と(b) 高被覆率のナフタレンの赤外スペクトル

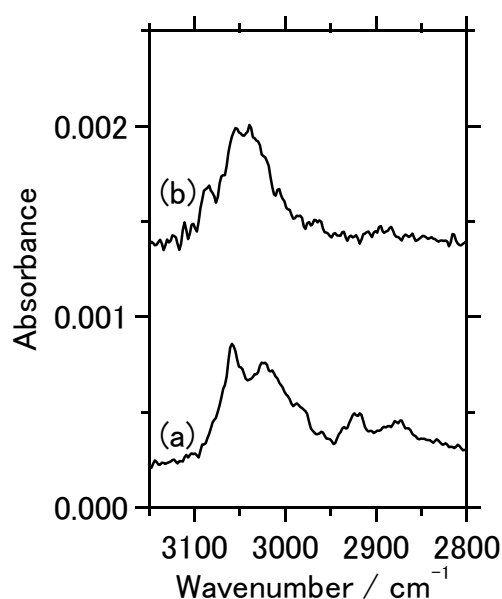


図 4 (a) ペンタセンと(b) ペリレンの赤外スペクトル