

# ペンタセン薄膜のX線回折法による構造解析

ソニー(株) 越谷 直樹

BL16XU

フレキシブルディスプレイや大面積ディスプレイなどの実現のために有機分子材料を用いた電子デバイスの開発が行なわれている。特にペンタセンに代表される低分子芳香環化合物は、有機TFTの半導体材料として有望視されている。キャリア移動度は低分子芳香環化合物材料では、分子の配列、配向やパッキングなどに支配される。そのため有機半導体の薄膜状態において、結晶構造を把握することは移動度の向上を図るうえで重要である。そこで放射光X線回折により、有機半導体薄膜の結晶性について評価を試みた。

試料は有機半導体ペンタセンおよびペンタセン誘導体を、絶縁膜を形成したSi基板上に成膜したものをを用いた。図にペンタセン薄膜のIn-plane XRDプロファイルを示す。XRDプロファイルから、Thin-film相が主に存在するが、面内方向の格子定数がわずかに異なるBulk相が混在していることが分かった。

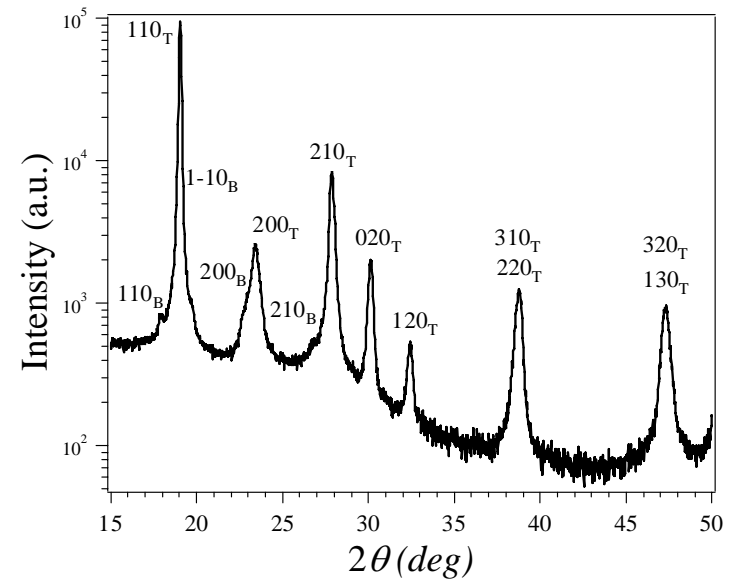


図. ペンタセン薄膜のIn-plane XRDプロファイル

# ペンタセン薄膜のX線回折法による 構造解析

ソニー(株) 先端マテリアル研究所

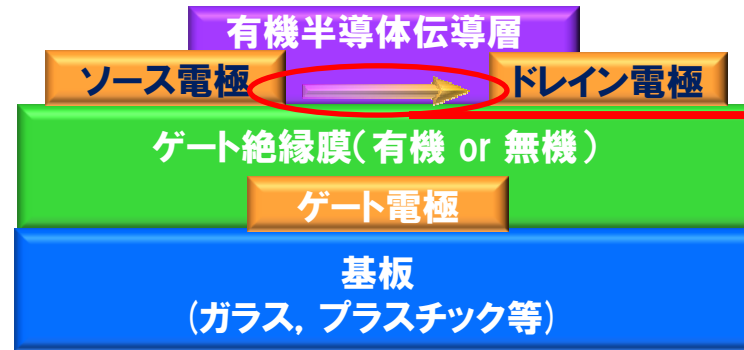
越谷直樹、村上洋介、小林典仁、工藤喜弘

# 背景・目的

有機TFT駆動有機EL  
フレキシブルディスプレイ

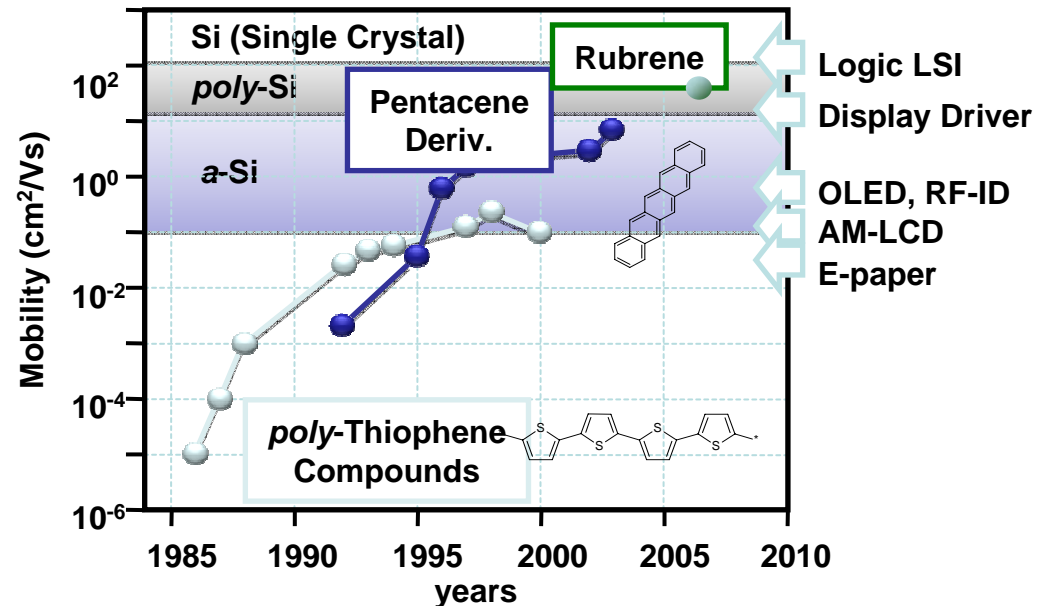


ボトムコンタクト・ボトムゲート断面構造



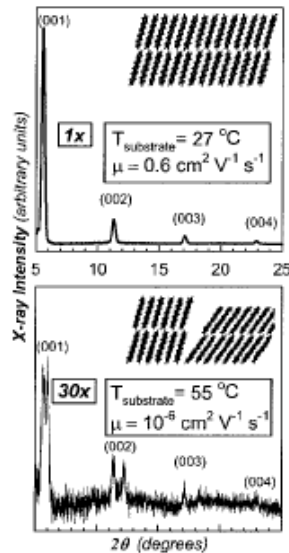
キャリア移動度の向上が  
最重要課題のひとつ

有機半導体材料の移動度の年次推移



結晶性と移動度の  
対応

C. D. Dimitrakopoulos  
and P. R. L. Malenfant,  
Adv. Mater.  
14 (2002) 99



キャリア移動度は、有機半導体の分子構造、結晶構造などに依存しており、薄膜状態での結晶構造を把握することが重要

→XRD、TEMにより有機半導体薄膜の微細構造解析を行う。

# 試料・実験

## 試料

有機半導体ペンタセンを $\text{SiO}_2$ を形成した  
Si基板の上に真空蒸着で成膜

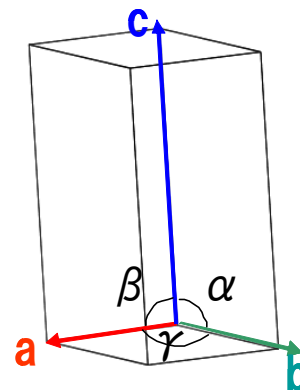
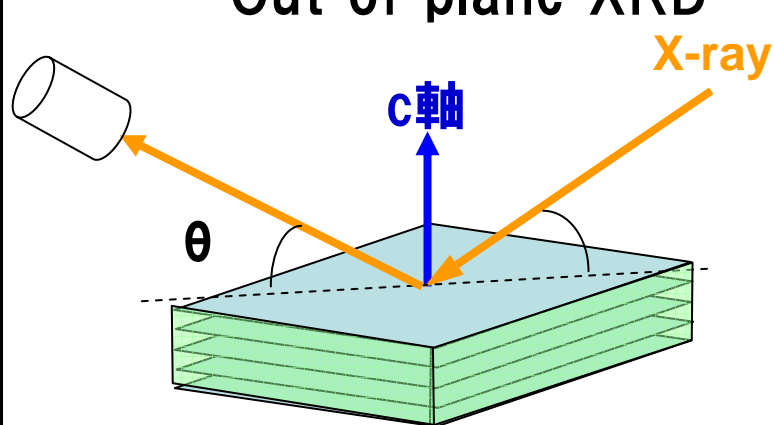


## 実験

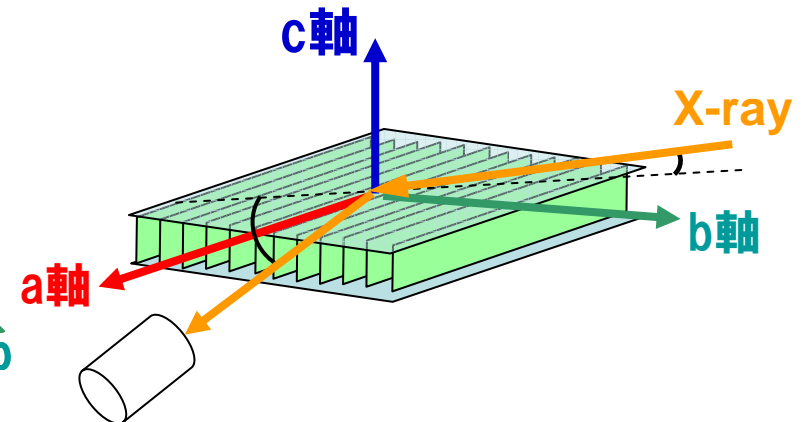
SPring-8 サンビームBL16XU利用

入射光エネルギー 8keV、Out-of-plane、In-plane配置で測定

### Out-of-plane XRD

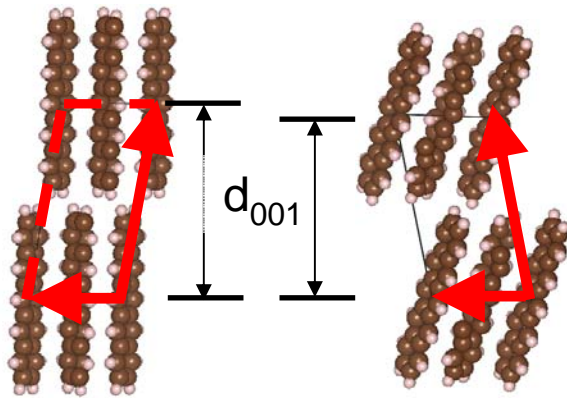
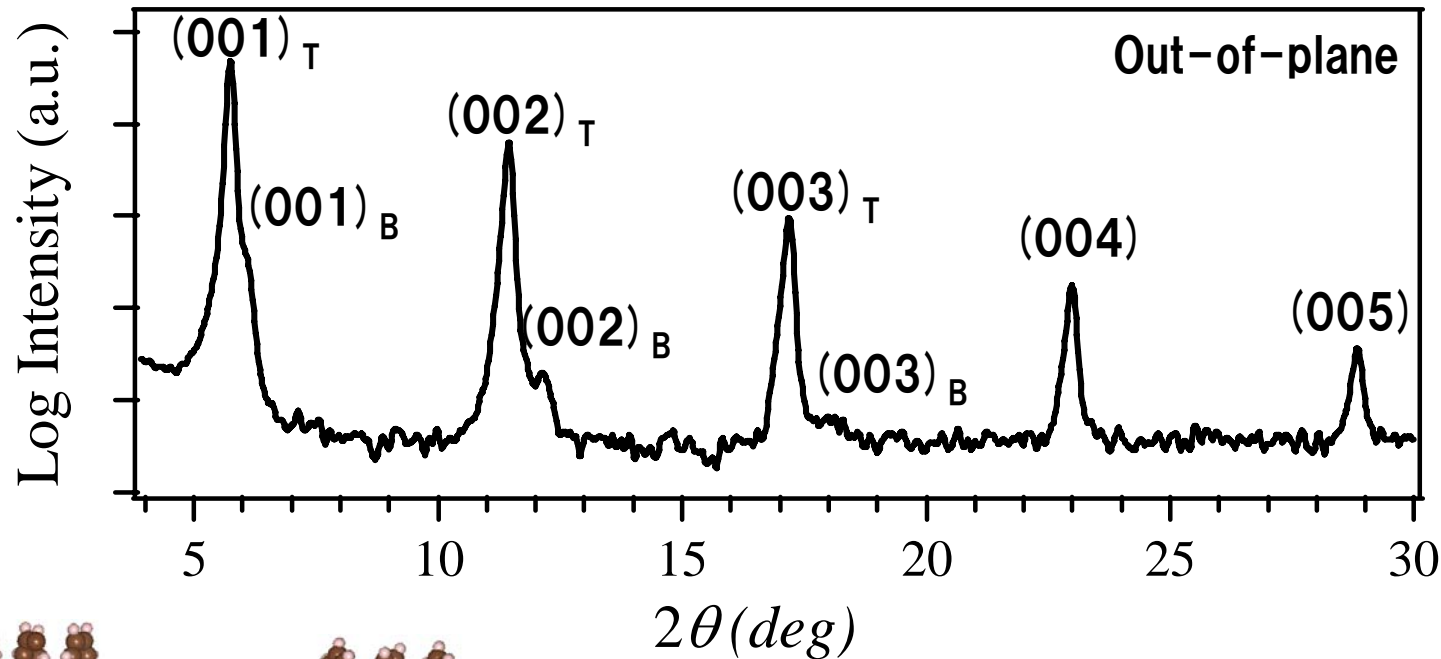


### In-plane XRD



# XRDによるペンタセン薄膜結晶評価

pentacene (150nm thick) / SiO<sub>2</sub> / Si sub.



(00l)のみを観測→c軸配向

thin film phase:  $d_{001} = 1.54$  nm

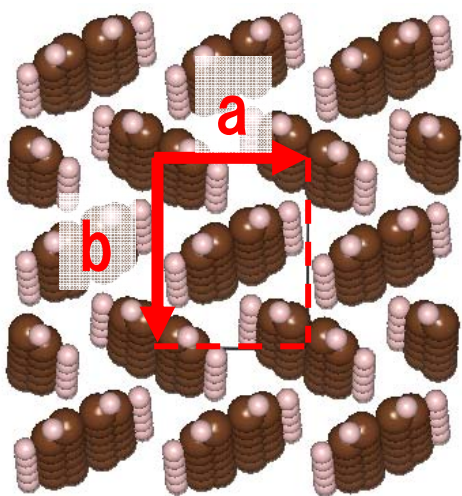
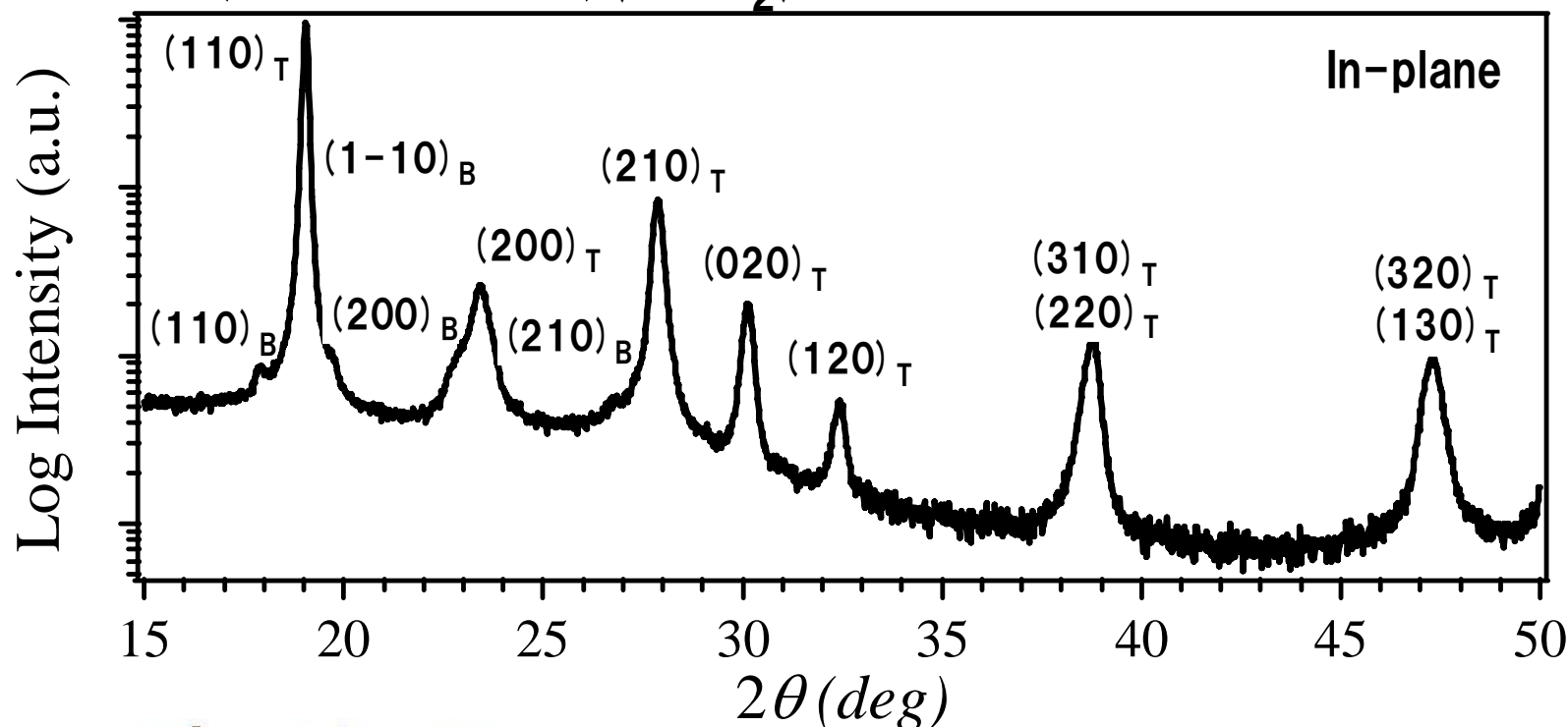
bulk phase:  $d_{001} = 1.45$  nm

thin-film phaseは面直方向に拡大

thin-film相とbulk相が混在

# XRDによるペンタセン薄膜結晶評価

pentacene (150nm thick) / SiO<sub>2</sub> / Si sub.



thin film phase:

$$a=0.592\text{nm}, b=0.757\text{nm}, \gamma=89.9\text{deg}$$

bulk phase:

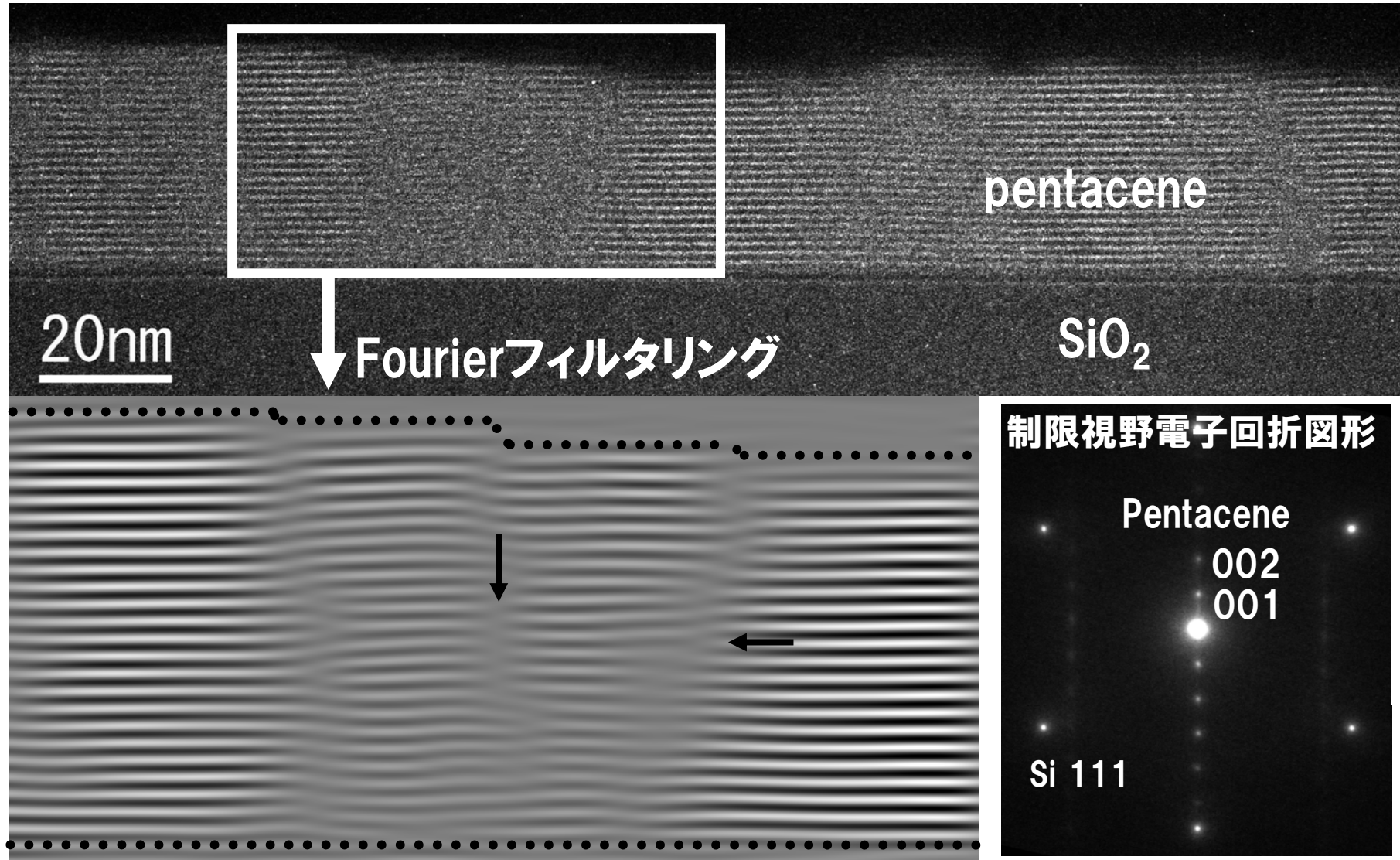
$$a=0.612\text{nm}, b=0.776\text{nm}, \gamma=86.1\text{deg}$$

thin-film phaseは面内方向に収縮

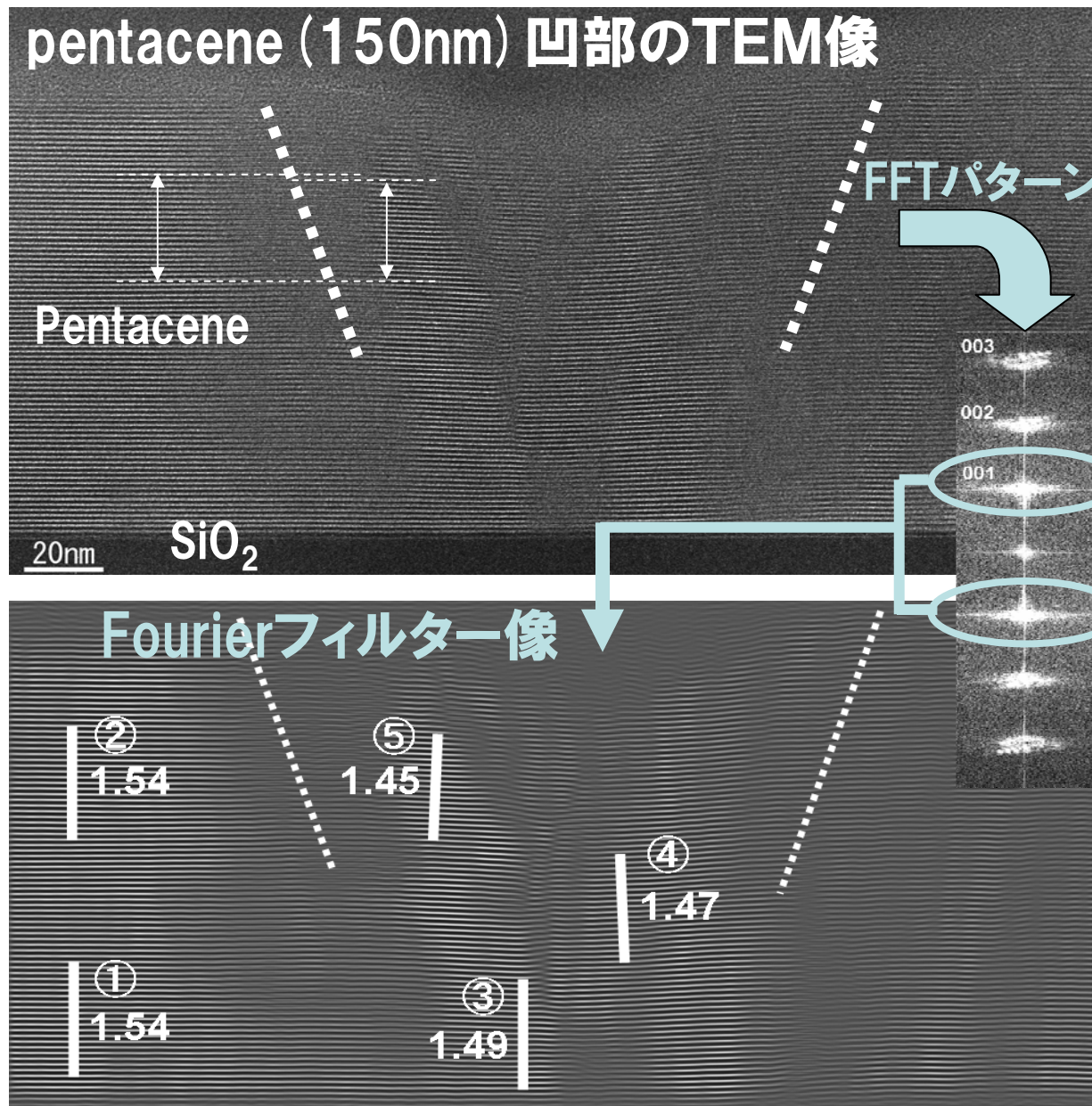
# ペンタセン薄膜のTEM解析

pentacene (40nm thick)  
/SiO<sub>2</sub>/Si sub.

積層周期はXRDでのthin-film phaseに一致  
結晶粒界に結晶欠陥(積層不整など)が存在



# ペンタセン薄膜のTEM解析



凹部結晶粒界領域に、  
結晶欠陥 (積層不整) あり

(001) 面間隔のXRD測定値  
との対応から相を特定:

①② 1.54nm

→ thin-film phase

③④ 1.49~1.47nm

→ 遷移領域

⑤ 1.45nm → bulk phase

## bulk phase生成メカニズム

膜厚増加に伴う粒界増加で、凹部に応力集中  
⇒格子歪みを緩和する  
ように、結晶欠陥と  
bulk phase生成



## まとめ

ペンタセン薄膜をXRD、TEMで解析した結果、その微細構造について以下の知見が得られた。

- ペンタセン薄膜は基板に対してほぼc軸配向しており、膜厚の増加に伴いthin-film相からbulk相へと移行した。
- 膜厚増加により応力を緩和するように結晶欠陥やbulk相が生成すると推測される。