

有機/金属電極界面における電気二重層の 発現機構の検討

Investigation on origin of interface dipole formed at organic semiconductor/metal electrode interfaces

櫻井岳暁¹, 馬場暁久¹, R. R. Prakash¹, 間瀬一彦², 秋本克洋¹

¹筑波大院数理、²KEK 物構研

【はじめに】有機/金属電極界面でのエネルギー準位接続は、キャリア注入効率など、デバイス特性に影響を及ぼすため、これを制御することが不可欠である。¹⁾一方、有機/金属界面では電気二重層が発現しエネルギー準位接続に影響を与えるが、この発現メカニズムは明らかでない。我々は、系統的な分子群と金属(Au, Cu, Ag, Mg, Ca)間の相互作用を、紫外光電子分光法(UPS)とDFT計算を用いて研究した。

【実験】Si 基板の上に金属膜を蒸着形成し、続いて有機半導体を蒸着法により堆積し、測定試料を作製した。有機半導体には、カルバゾール系分子(CBP, CDBP, DCzPPy: 図1)を用いた。UPSの測定はBL-11D,-13Aにて行った。

【結果と考察】図2に金属の仕事関数に対する有機/金属界面の真空準位シフト Δ_{VL} (電気二重層に対応)をプロットしたグラフを示す。AuやCuなど高仕事関数金属上について、同じ構成元素からなる分子にもかかわらず、 Δ_{VL} の大きさが異なる様子が分かる。特に26DCzPPyと35DCzPPyでは、ピリジン基の窒素の位置が異なるだけで Δ_{VL} に約0.7 eVの差が現れた。続いて、DFT計算より各分子の窒素のMulliken Charge(電子の偏りを示す)を導出したところ、この絶対値が小さくなるのに伴い Δ_{VL} が大きくなる様子が明らかになった。なお、窒素上の電子の非局在化は、分子の π 軌道によりもたらされる傾向がある。従って、分子の π 軌道と金属間の相互作用が変化した結果、 Δ_{VL} が変動したものと推測される。

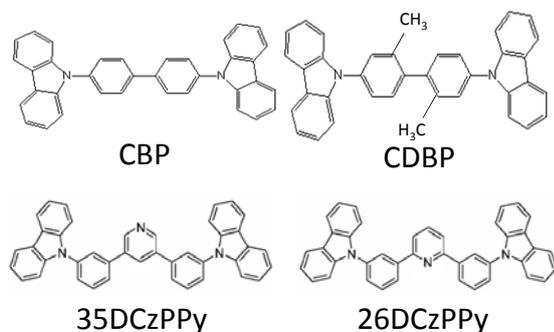


図1. カルバゾール系分子の化学構造

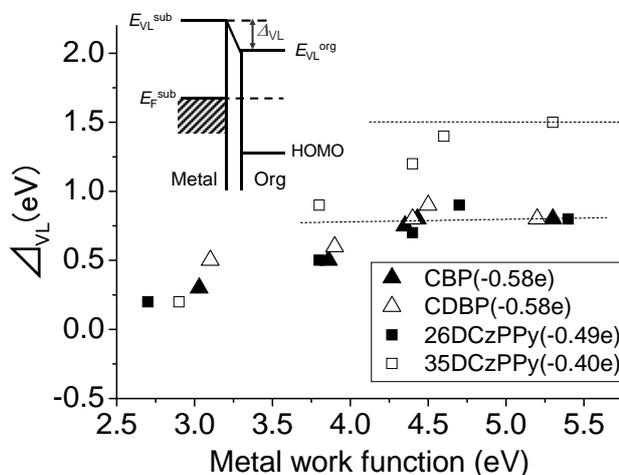


図2. 基板の仕事関数と真空準位シフト Δ_{VL}
(カッコは分子内の窒素原子のMulliken Charge)

1) T.Sakurai et al., J.Appl.Phys. **107**, 043707 (2010).