

有機半導体/金属界面電子準位接続と分子構造の相関

Influence of chemical structure of molecules on energy level alignment at organic semiconductor/metal interfaces

筑波大数理¹, JST さきがけ², KEK 物構研³, 櫻井岳暁^{1,2}, 王生活¹, 付巍¹, 間瀬一彦³, 秋本克洋¹
Univ. of Tsukuba¹, JST-PRESTO², KEK-IMSS³, T. Sakurai^{1,2}, S. Wang¹, W. Fu¹, K. Mase³, and K. Akimoto¹

E-mail: sakurai@bk.tsukuba.ac.jp

【緒言】有機/金属電極界面でのエネルギー準位接続は、キャリア注入効率や接触抵抗など有機半導体デバイスの特性に影響を及ぼすことが知られており、この制御が重要である [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未だ明らかでない。我々は、カルバゾール系化合物と金属の組み合わせについて、界面電気二重層の発現機構について議論し、分子配向や化学結合状態が電気二重層の大きさに影響を及ぼすことを報告した[2]。今回、光電子分光法 (UPS, XPS) ならびに軟 X 線吸収端近傍微細構造 (NEXAFS) の測定により、窒素、炭素、水素から成る有機半導体の分子構造と金属間に形成される電気二重層の大きさの相関について調べたので、これを報告する。

【実験】RCA 洗浄を行った Si 基板を超高真空槽中 1000°C で通電加熱し、続いて室温で Au 薄膜を蒸着形成した。次に有機半導体分子を分子線蒸着法により堆積し、測定試料を作製した。有機半導体は、電子輸送性を有するカルバゾール系分子 (CBP, CDBP, 26DCzPPy, 35DCzPPy)、フェナントロリン系分子 (BCP)、トリアゾール系分子 (TAZ) を用いた。各分子構造を図 1 に示す。UPS、XPS、NEXAFS は、高エネ研 Photon Factory BL-11D ならびに 13A にて測定した。

【結果】有機半導体/Au 界面での電気二重層の大きさは、BCP、TAZ、35DCzPPy では 1.5 eV 以上の値を示すのに対し、CBP、CDBP、26DCzPPy は 0.8 eV であった。一方、Au 界面での XPS (図 2) を測定すると、電気二重層の大きな BCP、TAZ、35DCzPPy では π 軌道を構成する窒素のケミカルシフトを確認したのに対し、26DCzPPy、CBP の XPS ではケミカルシフトを確認できなかった。これより、BCP、TAZ、35DCzPPy では Au と窒素の相互作用が、電気二重層に影響を与えることが判明した。なお、TAZ、BCP の分子配向は Au 基板表面に対しほぼ平行であり、このとき分子の永久双極子は基板法線方向を向かないため、電気二重層への寄与は小さい。よって、Au 界面での電気二重層は、 π 軌道に組み込まれる窒素と金属の相互作用により、主に変化すると推測される。

【参考文献】[1] T.Sakurai et al., J. Appl. Phys. **107**, 043707 (2010). [2] 櫻井他, 2012 年春季応用物理学会 16p-F-10.

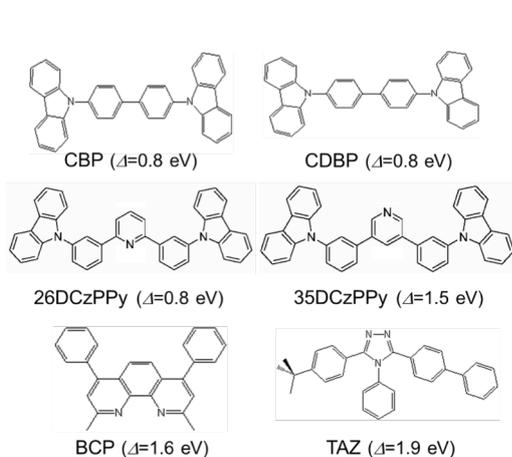
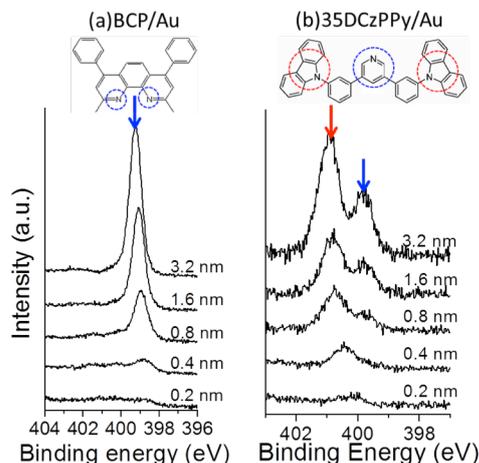
図 1. 分子構造と Au 界面の電気二重層(Δ)

図 2. (a)BCP と (b)35DCzPPy の N1s-XPS (スペクトル横に膜厚)