

有機半導体界面での励起子解離過程におけるキャリア-格子相互作用

Carrier-Lattice Interaction Effects on Exciton Dissociation at Organic Semiconductor Interface

○枘 慶充¹, 中山 隆史¹ (1. 千葉大理)

○Yoshimitsu Masugata¹, Takashi Nakayama¹ (1.Chiba Univ.)

E-mail: mass@chiba-u.jp

有機分子薄膜を用いた太陽電池は低コストでフレキシブルな太陽電池として注目され、その高効率化を目指して構成分子種や最適構造の模索が精力的に行われている。有機太陽電池では、半導体界面における励起子の解離が発電効率を支配する重要な過程のひとつであり、バンドオフセットなどの界面の物理量がある適当な値を取るときに解離確率は最大になることが分かってきた[1]。一方、有機分子半導体中のキャリアの動きを理解するためにはキャリア-格子相互作用を考慮することも重要である[2]。そこで本研究では、Fig.1 に示すような 1 次元強束縛モデル、Holstein モデルを用いて電子-正孔対波束の時間発展シミュレーションを行い、励起子解離過程におけるキャリア-格子相互作用の効果を調べた。

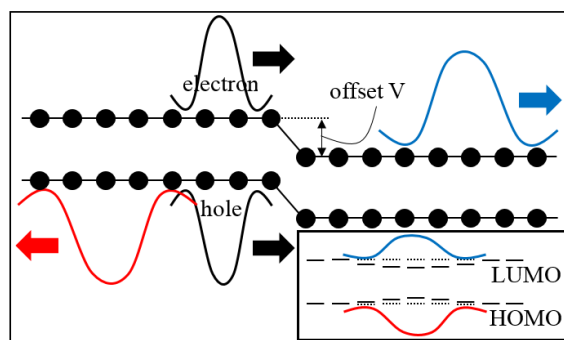


Fig.1 Schematic view of one-dimensional tight-binding model and Holstein model adopted in this work. Both electron and hole have energy-level offset V at the interface. Initial exciton is scattered at the interface and dissociated, then electron and hole are moving into right and left sides, respectively.

Fig.2 に、典型的なパラメータ値に対する励起子の解離確率を、界面のオフセット値 V の関数として示す。キャリア-格子相互作用がない時 ($\beta=0$) とある時 ($\beta \neq 0$) を比べると、 $V < 3.5$ では、キャリア-格子相互作用によって解離確率は減少する。これは、解離を促す励起子の運動エネルギーが、格子振動へと散逸してしまうためと考えられる。一方、 $V > 3.5$ では、キャリア-格子相互作用によって解離確率は増加する。これは励起子の運動エネルギーが減少したことにより界面の前後でのインピーダンスミスマッチが改善され、電子の透過が起こりやすくなったためであると考えられる。講演ではこれら結果の詳細を説明する。

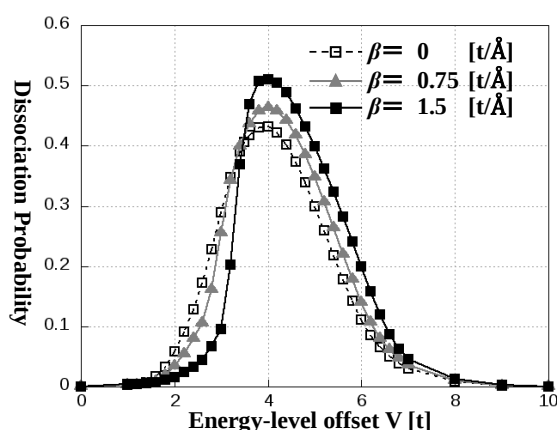


Fig.2 Dissociation probability of exciton as a function of energy-level offset V [t (transfer)] at the interface, for various values of Carrier-lattice interaction β [$t/\text{\AA}$].

[1] K. Sato et al., PS-15-13, Solid State Devices and Materials (2013)

[2] H. Ishii et al., Phys. Rev. B **85**, 245204 (2012)