

有機半導体界面の励起子解離過程における界面ポテンシャル効果

Interface Potential Effects on Exciton Dissociation at Organic Semiconductor Interfaces

○枅潟 慶充¹, 飯塚 秀行¹, 中山 隆史¹ (1.千葉大理)

°Yoshimitsu Masugata¹, Hideyuki Iizuka¹, Takashi Nakayama¹ (1.Chiba Univ.)

E-mail: mass@chiba-u.jp

有機薄膜太陽電池の励起子解離過程はドナー・アクセプタ(D/A)界面で起こるため、D/A 界面近傍のポテンシャル形状は励起子解離過程に大きな影響を及ぼすと考えられる。実際、D/A 界面に中間層を挿入したデバイスでは電荷分離効率が向上することが報告されている[1]。また、最近の XSTM 実験によると、P3HT/PCBM 界面には 1.6nm 程度の一様なエネルギー準位の傾きが存在することが観測されている[2]。しかし、界面ポテンシャル形状に関する系統的な理論研究は未だ行われていない。そこで本研究では、1 次元タイトバインディング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[3]、励起子解離過程における D/A 界面近傍のポテンシャル形状効果について調べた。

本研究では、図 1 に示すように、界面に N_c サイト幅の中間層がありポテンシャルが一様に変化する場合を考えた。図 2 に、励起子解離確率の電子オフセット V_e 依存性を示す。以下の特徴が明らかになった：(1) 1 サイト幅の中間層が挿入されると、界面での波動関数の接続が改善されて解離確率は大幅に増加する。(2) 中間層幅がさらに増えると、低オフセット側の解離確率は減少する。これは、中間層挿入によって電子オフセットの変化が滑らかになり、クーロン束縛が破れにくくなるためである。(3) 中間層が存在すると、電子・正孔のいずれかが界面にトラップされる解離が起こる。これは、界面に単独キャリアの束縛状態が生じるためである。

講演ではこれら結果の詳細を説明すると共に、正孔オフセット V_h を変化させた場合の結果についても議論する。

[1] M-C. Shih et al, Nano. Lett. **13** (2013) 2387. [2] S. Izawa et al, Adv. Mater. **27** (2015) 3025. [3] H. Iizuka et al, Jpn. J. Appl. Phys. **55** (2015) in press.

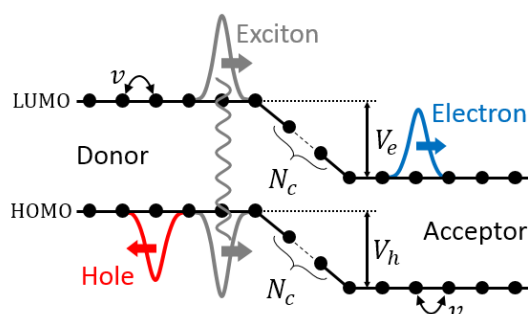


Fig.1 Schematic view of 1-dimensional tight-binding model adopted in this work. Electron and hole have energy-level discontinuities, V_e and V_h , at the D/A interface, respectively. Initial exciton is scattered at the potential-sloped interface having a width, N_c . Then, electron and hole move to acceptor and donor regions, respectively.

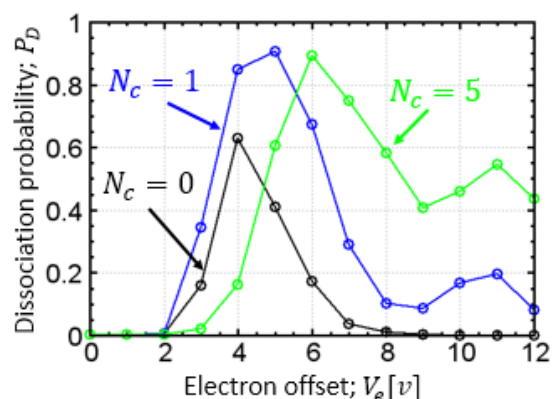


Fig.2 Exciton dissociation probability as a function of electron offset, V_e [v], for various values of potential-sloped interface width, N_c . Hole offset, V_h , is fixed to be 8 [v]. Here, v is the carrier transfer energy and is used as a unit.