

金属/有機半導体界面電子準位接続に対する金属表面の遮蔽効果

Screening effect of metal surface on the metal/organic interface energy level alignment

○(M1)相原巧実¹、(M2)植村悠紀¹、(D1)Syed A. Abd Rahman¹、(M1)高橋勁巳¹、吉田弘幸^{1,2}

(千葉大院工¹, 千葉大分子キ²)

Takumi Aihara¹, Yuki Uemura¹, Syed A. Abd Rahman¹, Keishi Takahashi¹, Hiroyuki Yoshida^{1,2}

(Chiba Univ.¹, MCRC, Chiba Univ.²)

E-Mail: t.aihara@chiba-u.jp

金属と有機半導体の界面電子準位接続は、有機半導体デバイスの電荷注入・収集効率を決定することから重要である。これまで、界面電気二重層の形成やバンドの曲がりについては、紫外光電子分光法(UPS)により詳しく調べられてきた。一方で、金属表面近傍の有機半導体中の電荷は、金属表面の遮蔽効果の影響をうけるはずであるが、定量的に信頼できる実験データがなく、ほとんど議論されてこなかった。

本研究では、金属と有機半導体界面に、UPSとともに低エネルギー逆光電子分光法(LEIPS)¹を適用し、膜厚を増やしながら HOMO と LUMO の両方の変化を調べることで、金属表面による遮蔽効果を調べた。² 金属表面には Ag(111)と Au(111)、分子には寝た配向で層成長することが知られている PTCDA を用いた。

Fig.1 に PTCDA/Ag(111)の UPS と LEIPS のスペクトルを示す。膜厚増加とともに、赤で示した HOMO ピークは高エネルギー側に、青で示した LUMO ピークは低エネルギー側にシフトした。Fig.2 には、Au(111)を基板に用いた際の結果も含めた HOMO(赤)、LUMO(青)のピークのエネルギーを膜厚の関数として示した。

分子上の電荷により金属表面に誘起される電荷は、鏡像電荷で近似できる。イオンの電荷を点電荷 e で近似し、金属表面との距離を r 、有機層の誘電率を ϵ とすると、遮蔽効果によるエネルギー変化 U は、

$$U = \frac{e^2}{16\pi\epsilon r} \quad (1)$$

と表される。式(1)から膜厚の増加に伴うエネルギーの変化を計算し、Fig.2 に実線で示した。 r には実験による PTCDA の分子間距離と金属表面に対する吸着距離の文献値を用いた。実験値と計算値の結果はよく一致した。

本研究で測定した金属遮蔽効果によるエネルギー準位の変化は、表面第一層で 0.25 eV にもなり、金属/有機界面電子準位接続に大きな影響を与えることが分かった。

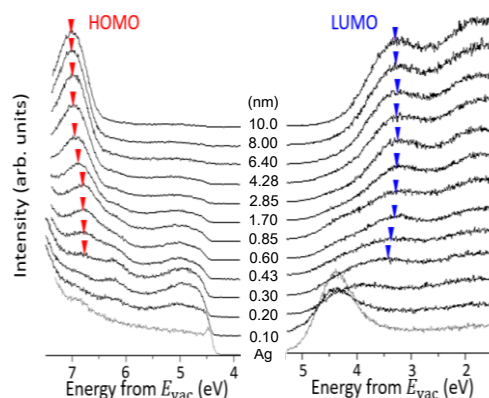


Fig.1: UPS(left) and LEIPS(right) spectra of PTCDA/Ag(111).

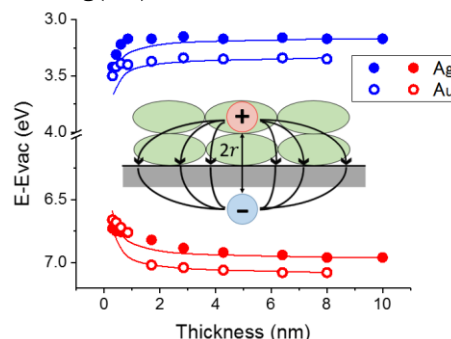


Fig.2: Energy levels of PTCDA as a function of film thickness. The inset shows image charge model.

[1] H. Yoshida, *Chem. Phys. Lett.* **539-540** 180 (2012).

[2] K. Yamada et al., *Phys. Rev. B* **97** 245206 (2018).