有機ヘテロ界面における局所的無秩序化に関する STM 解析

STM study on local disordering upon organic heterointerface formation

東理大[1]，物材機構 MANA[2]　○(M2)大西 瞭[1]，赤池 幸紀[1]，若山 裕[2]，金井 要[1]
Tokyo Univ. of Sci[1], NIMS, WPI-MANA[2], ◦A. Onishi[1], K. Akaike[1], Y. Wakayama[2], K. Kanai[1]
E-mail: 6217607@ed.tus.ac.jp

異種の有機半導体が接する有機ヘテロ界面は、有機太陽電池をはじめとするさまざまな有機デバイスの動作に重要な自由電荷の発生や再結合の場であり、分子レベルでの界面設計や構造解明が広く研究されてきた。一方で、真空蒸着などで形成された有機ヘテロ界面では、界面形成に伴い秩序構造が乱れ[1]、それが界面電子準位接続にも影響する場合があることが光電子分光と静電的なモデルを用いたポテンシャル計算から示唆されている[2]。この界面形成時に構造が乱れる原因を解明するためにも、無秩序化した有機ヘテロ界面の局所構造の解析が必要である。そこで、本研究では、界面構造が無秩序化すると考えられている[1]フッ素化銅フタロシアニン(F_{16}CuPc)と α-セキシチオフェン(α-6T)の界面における局所構造を、走査型トンネル顕微鏡(STM)を用いて直接観察し、構造変化を引き起こす原因の微視的理解を目指した。

まず超高真空チャンバー内で Ar スパッタとアニールで清浄化した Ag(111)基板の上に、F_{16}CuPc の単分子層を真空蒸着で作製し、Ag の[1−21]方向に F_{16}CuPc が秩序的に並ぶことを確認した[Fig. 1(a)]。次に F_{16}CuPc 分子層の上に α-6T を蒸着すると、多くの α-6T は形状を柔軟に曲げながら F_{16}CuPc の分子間に割込み、両方の分子が単一分子レベルで混合した無秩序相を形成することが分かった[Fig. 1(b)]。このように、α-6T が形状を曲げて F_{16}CuPc の分子間に入り込むということは、α-6T と F_{16}CuPc の間で強い分子間相互作用が働いているのではないかと考えた。そこで、分子末端の官能基が水素になっている銅フタロシアニン(CuPc)に変えて同様の実験を行った結果、α-6T と CuPc の相分離が生じることが分かった[Fig. 1(c)]。さらに、α-6T の形状柔軟性の寄与を調べることを目的として、セキシフェニル(6P)/F_{16}CuPc/Ag(111)ヘテロ構造を解析した[Fig. 1(d)]。以上の結果を合わせて、講演では異種分子間の相互作用および分子のサイズや柔軟性が無秩序相の形成に及ぼす影響を議論する。

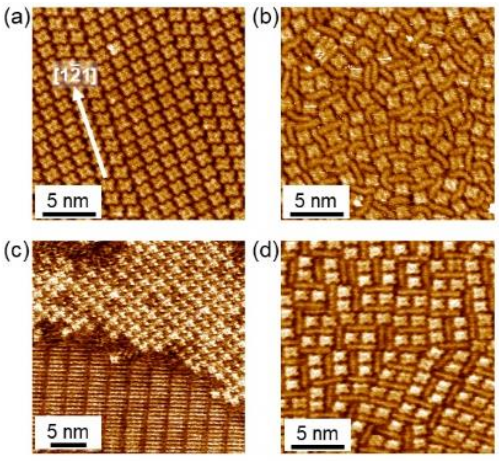


Fig1. STM images of (a) F_{16}CuPc monolayer, (b) α-6T/F_{16}CuPc heterostructure, (c) α-6T/CuPc heterostructure and (d) 6P/F_{16}CuPc heterostructure on Ag(111).

[参考文献]

[1] R. Ye *et al*., *Solid State Electron*. **54**, 710-714, (2010)
[2] K. Akaike *et al*., *Adv. Mater. Interfaces*. **2**, 1500232, (2015)

© 2019年 応用物理学会