

有機薄膜デバイスの電流－電圧特性の計算

(東京大学 物性研究所) 田島 裕之

有機半導体デバイスの分野は、近年大きな進展を遂げている。一方で、デバイスの動作原理に関しては依然として不明な点が多い。この分野の研究は、無機半導体の教科書を参考にして行われている面もあるが、チャンネル長が短くドーパントの制御ができない有機半導体においては、基本に戻ってデバイスの動作原理を調べて行く必要がある。そこで本研究では、半導体デバイスとしては最も基本的なショックレー方程式を用いたプログラム（デバイスシミュレーター）を作成し、いくつかのケースに関して計算を行った。

< 基本輸送方程式 >

ショックレー方程式は、Poisson の式を含む以下の 5 個の偏微分方程式である。

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} = -\frac{\rho}{\epsilon} \dots\dots$$

$$\vec{J}_p = e\mu_p p \vec{E} - eD_p \vec{\nabla} p \dots\dots\dots$$

$$\vec{J}_n = e\mu_n n \vec{E} + eD_n \vec{\nabla} n \dots\dots\dots$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{e} \text{div}(\vec{J}_n) + (G_n - U_n) \dots\dots\dots$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \text{div}(\vec{J}_p) + (G_p - U_p) \dots\dots\dots$$

ここで、 G_n, U_n, G_p, U_p は電子とホール生成、および消失速度をあらわす。微分方程式を解くためには、初期値を仮定する必要があるが、今回の計算では、ohmic 接合

$$\Phi(L) - \Phi(0) = E_{F2} - E_{F1} - V_{ext}$$

$$p(0) = N_c \exp(-E_{F1}/k_B T); \quad p(L) = N_c \exp(-E_{F2}/k_B T) \dots\dots\dots$$

$$n(0) = N_c \exp[-(E_G - E_{F1})/k_B T]; \quad n(L) = N_c \exp[-(E_G - E_{F2})/k_B T]$$

を、大部分の計算で仮定した。ここで、 E_{F1}, E_{F2} は価電子バンドの top と両端の電極のフェルミレベルとのエネルギー差、 V_{ext} は外部電圧をあらわす。

< SRH 近似 >

トラップが存在する場合は、いわゆる SRH 近似を用いてキャリアとトラップの衝突を考えた。この近似では負のトラップのとき、トラップに関する速度方程式を

$$dn_t/dt = (N_t - n_t)(c_n n + e_p) - n_t(c_p p + e_n); \quad c_n = V_{th} \sigma_n; \quad c_p = V_{th} \sigma_p;$$

$$e_n = V_{th} \sigma_n n_0 \exp[(E_t - E_i)/k_B T]; \quad e_p = V_{th} \sigma_p n_0 \exp[(E_i - E_t)/k_B T]$$

であらわす。ここで n_t, N_t はそれぞれ、トラップに捕らえられた電子濃度、トラップ

濃度をそれぞれ表す。また、 V_{th} 、 σ_p 、 σ_n はそれぞれ熱速度、捕獲断面積を表す。また n_0 、 E_t 、 E_i はそれぞれ真性半導体のキャリア濃度、トラップのエネルギー準位に対応する。

<トラップのあるときの電流電圧特性>

最近我々は、光電流の温度依存性を測定するに当たって、逆ヒステリシスループ(いわゆる通常のヒステリシスではないことに注意)を示す例を見出した。(磯崎ら 4D01、本討論会)この実験結果を説明するために、トラップを考慮した計算を行ったところ、実験結果を定性的に再現する結果を得た。図1に示したのは、そのうちの電流 - 電圧特性に関するものである。トラップを考慮することにより、電流 - 電圧特性の逆ヒステリシスカーブが再現されていることがわかる。図2は、この逆ヒステリシスループが観測されているときの電子トラップ濃度、図3はポテンシャルカーブを示す。図からわかるように、トラップに捕らえられた電子が作るポテンシャルが変化するために、逆ヒステリシスループが生じていることがわかる。このようなヒステリシスループは、ホールがメインキャリアの物質では、負電荷のトラップに対してしか起こらない。また、トラップ準位が十分に深い必要がある。逆ヒステリシスループは暗電流よりも光電流でより起こりやすい。このような結果は、実験結果と一致しており、この計算が有用であることを示している。

<今後の課題>

今回の計算では、トンネル過程によるキャリア注入プロセスが、考慮されていない。極低温あるいは強電場では、この効果を取り入れることが重要であり、この点をクリアすべく現在研究を進めている。

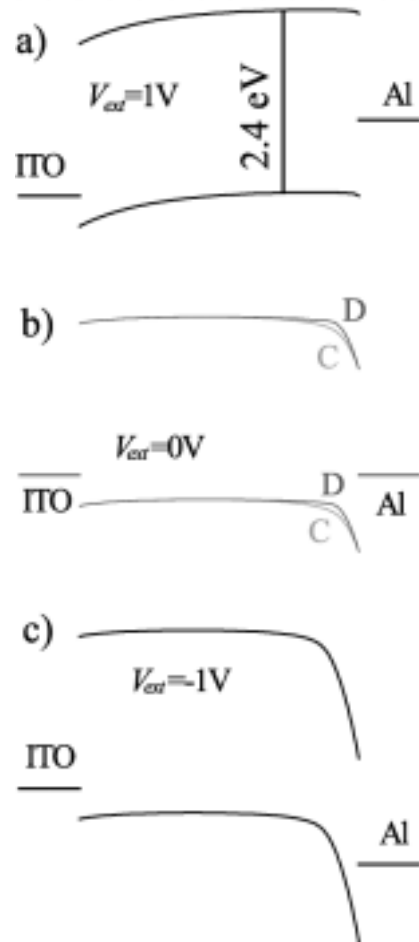


図3 ポテンシャル変化(計算)

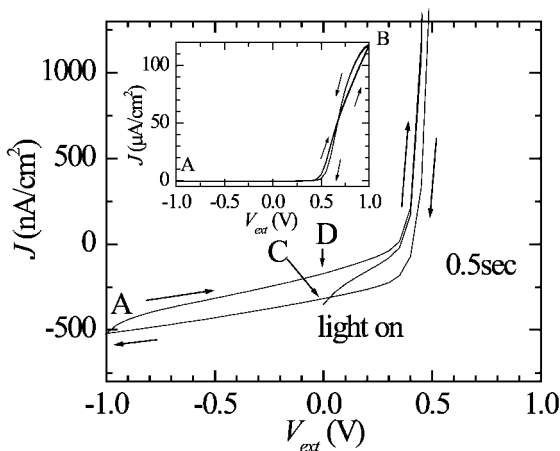


図1 異常な電流 - 電圧特性 (計算) 挿入図は-1V から 1V の電流電圧特性

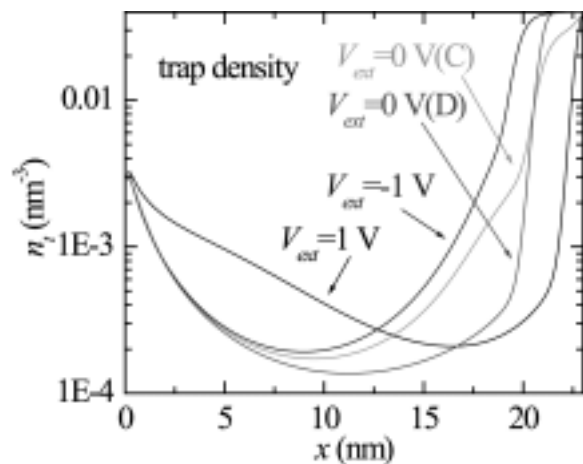


図2 トラップ濃度の変化 (計算)