

高エネルギー分光法による

Ba / poly(9,9-dioctylfluorene)界面電子構造の研究

(名大院理¹、名大物質国際研²) 坂井 健太郎¹、金井 要²、大内 幸雄¹、関 一彦¹

【序】近年、有機 EL や有機トランジスタなどの有機物質を用いた素子が盛んに研究されている。これらの有機デバイスの性能は各界面での電子構造や有機薄膜の膜構造などに大きく左右される。例えば、電子構造に関しては金属のフェルミ準位と有機物の HOMO や LUMO とのエネルギー差、すなわちホールや電子の注入障壁は小さいほうがよい。また膜構造に関しては、

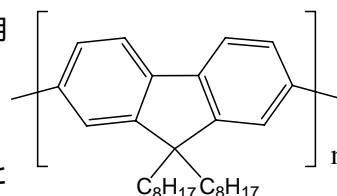


図1 PFOの分子構造

例えば有機トランジスタでは結晶性の高い均一な膜の方が高性能なデバイスが得られると考えられている。よって有機デバイスの性能の向上には、界面での電子構造や膜構造を知り、それらを制御することが必要である。現在有機デバイスに应用が期待されている物質には低分子材料と高分子材料があるが、高分子材料はスピコーティング法やインクジェット法などの真空環境を必要としない溶液過程で有機薄膜を作製することが可能なため、工業応用において注目されている。本講演では、() その代表的な機能性高分子である poly(9,9-dioctylfluorene) (PFO) の金基板に対する配向性、() 高い電子注入効率を得られることが報告されている Ba 電極[1]との界面電子構造を、光電子分光法 (UPS、XPS)、逆光電子分光法 (IPES)、及び軟 X 線吸収微細構造 (NEXAFS) を用いて調べた結果について報告する。

【実験】PFO 薄膜は金基板上にスピコートし作製した。薄膜を作製してから超高真空チャンバーに導入するまでの過程はすべて窒素雰囲気下で行った。Ba 薄膜は真空蒸着法により作製した。Ba の蒸着時の真空度は $\sim 1 \times 10^{-5}$ Pa、測定時の真空度は $\sim 1 \times 10^{-8}$ Pa である。

【結果と考察】() PFO 分子の金基板に対する配向について

図2に金基板上にスピコートしたPFO薄膜のC K-edge NEXAFS スペクトルの X 線の入射角依存性を示す。X 線の入射角を変化させると、各スペクトルでの π^* と σ^* の強度比が大きく変化していることがわかる。図3は本研究から得られた各 X 線入射角に対する π^* のピーク強度と、その理論曲線[2]をプロットしたものである。これらの結果から PFO 分子のフェニル基の金基板に対する平均的な配向は、金基板表面からおよそ 45° 傾いて配向していることがわかった。

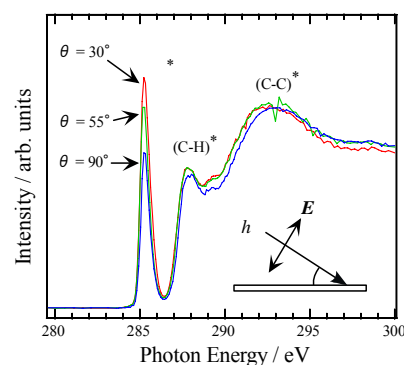


図2 C K-edge NEXAFS スペクトル

() Ba / F8 界面電子構造について

図 4 に Ba の各蒸着段階における Ba 3d 軌道の XPS スペクトルを示す。図中の数字は Ba の蒸着量の目安として、XPS 測定の結果から見積もった PFO の繰り返しユニットに対する Ba の原子数であり、一番上のスペクトルは Si 基板上に蒸着した Ba (40 nm) のスペクトルである。781 eV、796 eV 付近に注目すると蒸着量が 2.1 を越えたところから新しいピークが出現し始めていることがわかる。このピークは Ba のプラズモン励起に関するサテライトピーク[3]であり、Ba が凝集し始めたことを示している。

よって PFO 薄膜に Ba を蒸着すると蒸着の初期段階ではすぐに Ba は凝集せず、PFO 薄膜中へ拡散していると考えられる。図 5 は Ba の各蒸着段階における UPS-IPES スペクトルである。図 5 から、PFO 薄膜上に Ba を蒸着するとバンドギャップ内に新しい準位が生成していることがわかる。この新しい準位は膜中へ拡散した Ba から PFO 分子に電子移動が起こった結果生成したバイポーラロンの準位であると考えられる。

以上の結果から、電極界面において拡散した Ba によるドーピングの効果があることがわかる。このドーピングによって新たにバイポーラロン準位がフェルミ準位近傍のバンドギャップ内に生成するため、Ba 電極からの電子注入障壁を劇的に小さくする働きがあると考えられ、Ba 電極が高い電子注入特性を示す一因となっていると考えられる。発表では他の XPS の結果も示して Ba / PFO 界面電子構造に関してより詳細な議論を行う。

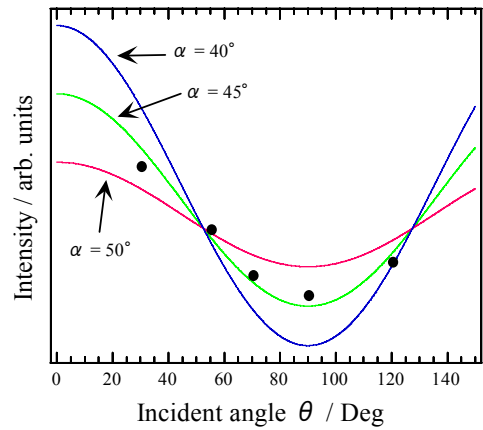


図 3 各 X 線入射角における * のピーク強度と理論曲線

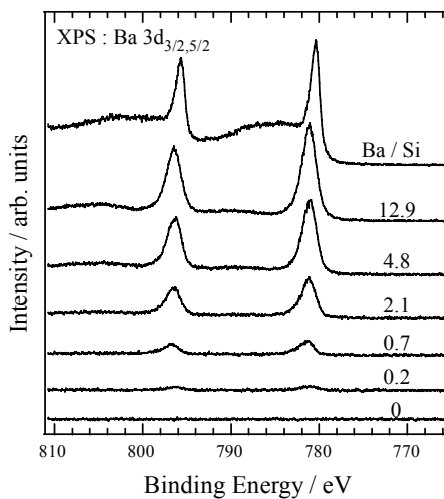


図 4 Ba3d 軌道の XPS スペクトル

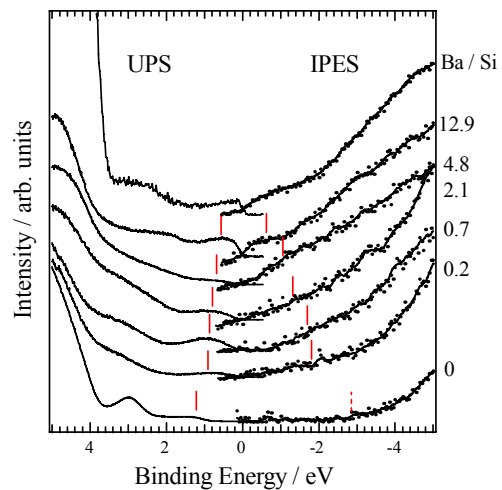


図 5 Ba / PFO 界面における UPS-IPES スペクトル

- [1] P. J. Brewer *et al.*, *Phys. Rev. B* **2005**, 71, 205209.
- [2] J. Stöhr, "NEXAFS Spectroscopy" Springer-Verlag 1992
- [3] J. A. Leiro *et al.*, *Phys. Rev. B* **1985**, 31, 8248.