

研究タイトル：**有機分子と金属電極との接合界面デザイン**
高効率有機EL、有機太陽電池、分子エレクトロニクス



氏名：	中西 寛 / NAKANISHI, Hiroshi	E-mail：	nakanishi@akashi.ac.jp
職名：	教授	学位：	工学博士
所属学会・協会：	日本物理学会, 応用物理学会, 日本表面真空学会, 日本中間子科学会		
キーワード：	有機EL, 有機太陽電池, 分子エレクトロニクス, オーミック接触		
技術相談 提供可能技術：	<ul style="list-style-type: none"> ・有機分子のデバイス実装技術の開発 ・有機分子デバイス電極材料の開発 		

研究内容：

近年、有機エレクトロルミネッセンス(有機EL)、有機太陽電池、分子エレクトロニクスなど有機分子を電子デバイスに組み込み機能性を発現させる部位とする需要が高まっている。本来、分子はそれ自身単独で安定であるため、電極に安定かつ再現性よく保持することは難しい。また分子と電極との間の電気伝導は、一般にはポテンシャル障壁があるためトンネル伝導となる。接合部の構造が安定しない状況下でのトンネル電流は、トンネル領域の電極-分子間距離の変化に指数関数的に依存するため、その電気的特性は極めて不安定となる。

我々は、密度汎関数理論に基づく第一原理計算を援用して、分子と電極表面の結合状態、電子状態を調査し、より好適な接合界面のデザインを行っている。

たとえば、ポルフィリン系の分子に対しては、キレート効果を用いて接合を強化するため分子側を窒素終端とすることが効果的であった。その上で接合界面でのポテンシャル障壁を解消する為、金属表面側の選定を遷移金属で行った結果、d 電子数に対して、障壁の高さは Volcano 型依存性を示すことがわかった(図1参照)。図より金属のd電子軌道がハーフフィリング近傍では、分子-電極間でフェルミレベル近傍の電子状態が消失するためポテンシャル障壁が高くなる事が分かる。すなわち、この場合窒素終端分子に好適な電極金属は周期表左右端の遷移金属元素 Ti, V, Cr, Zn, Zr, Nb, Mo, Cd, In, Sn, Hf, Ta, W である。

このように、電子状態を解析することにより、原理原則から使用する分子に適した接合界面をデザインすることができ、デバイスの安定性、寿命、効率等を改善することができる。また、この接合界面デザインは、カーボンナノチューブ(CNT)を電子デバイスに用いる場合に実装技術としても活用できる(図2)。

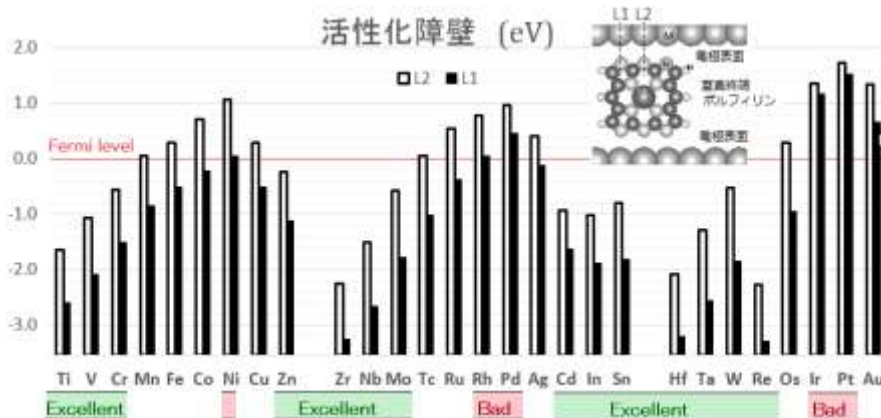


図1 接合界面における電子のポテンシャル障壁

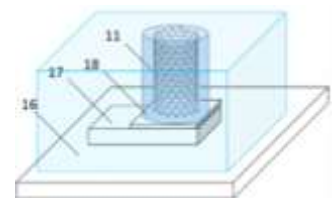


図2、CNTと金属電極の接合

提供可能な設備・機器：

名称・型番(メーカー)	