

## ●軟 X 線吸収分光 (XAS) による有機薄膜の分子配向評価

TN492

### Estimation of Molecular Orientation in Organic Thin Films by XAS

#### [概要]

近年、有機 EL や有機薄膜太陽電池等に利用される有機多層薄膜では、分子配向の制御が性能向上に繋がるといわれており、意図的に異方性を与える手法が注目されています。しかし、厚さ数十 nm の薄膜材料では、検出感度の問題や他成分の影響で解析難度が高くなるため、高度な評価技術が要求されます。ここでは、軽元素を高感度で評価可能な軟 X 線吸収分光 (XAS: X-ray Absorption Spectroscopy) 測定を用いた分子配向性の評価について紹介します。

#### [手法]

ここでは、異方性を有する電子輸送材料である B3PyMPM [4,6-Bis(3,5-di(pyridin-3-yl)phenyl)-2-methylpyrimidine] を用いて、真空蒸着法とスピコート法の 2 通りの方法で Si 基板上に厚さ 10 nm の薄膜を形成しました。測定範囲は、炭素と窒素の K 吸収端領域 (CK 端および NK 端) としました。

#### [事例]

試料面と入射する軟 X 線の成す角度 ( $\theta$ ) を変えて測定した、NK 端 XAS スペクトルを Fig. 1 に示します。真空蒸着法の試料 (a) は X 線入射角度を浅くするに従って、窒素の  $\pi$  結合に由来するピーク ( $\pi^*$ ) の強度比が相対的に高くなりました。一方、スピコート法の試料 (b) は、ピーク強度比が入射角度に依存しませんでした。軟 X 線の入射角度に対する  $\sigma^*$  と  $\pi^*$  の強度比の変化を Fig. 2 に示します。この結果から、B3PyMPM の全ての芳香環が同一平面にあると仮定したとき、基板法線と分子平面に垂直な  $\pi^*$  軌道のなす角度 ( $\alpha$ ) を算出できます。すなわち、真空蒸着法では水平配向性を示し、これは実際のデバイス特性において無配向性のスピコート膜よりも優れていることが判明しました。 ( $\alpha < 54.7^\circ$  (magic angle) では基板平面に対して水平配向、 $\alpha > 54.7^\circ$  では垂直配向、 $\alpha \sim 54.7^\circ$  では無配向を意味します)

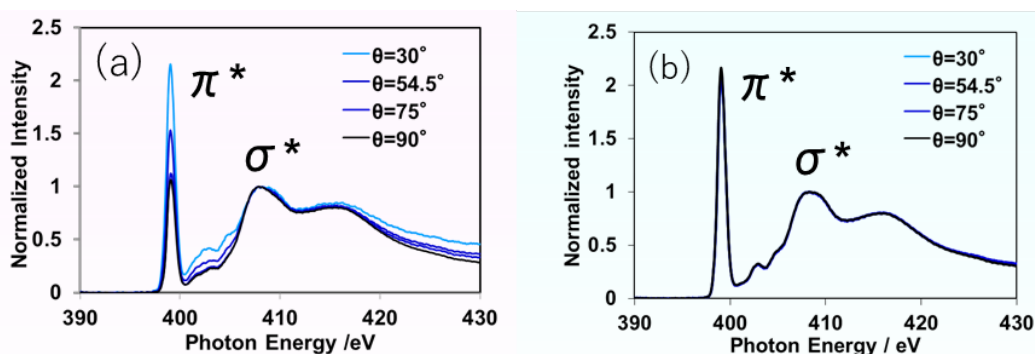


Fig. 1 NK-edge XAS spectra of B3PyMPM

(a) Vapor deposit (b) Spin-coated

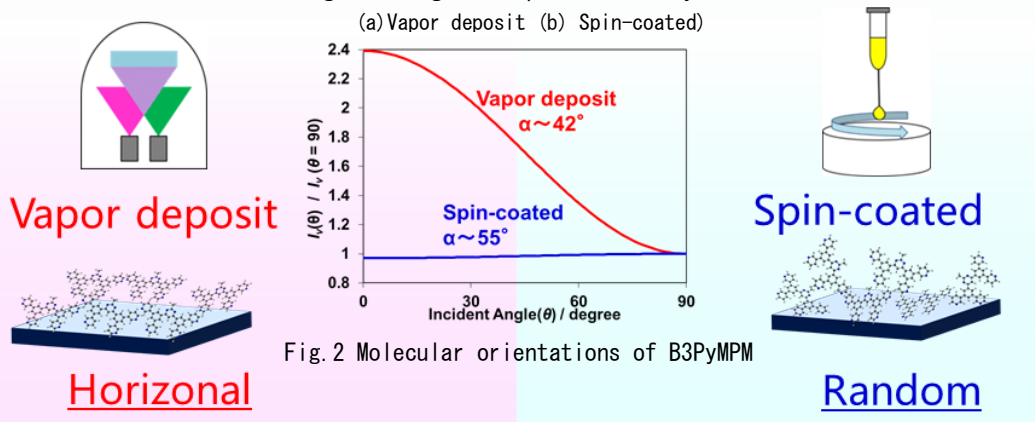


Fig. 2 Molecular orientations of B3PyMPM

#### [キーワード]

放射光軟 X 線、有機多層薄膜、有機エレクトロニクス