

3P034

角度分解光電子分光による高配向性ポリチオフェン薄膜のバンド構造の研究

(愛媛大学) ○八木創

ARPES study of the band structure of highly oriented P3HT thin films

(Ehime University) Hajime Yagi

【序】 導電性高分子は軽量、柔軟、印刷可能といった様々な利点を持つことから有用な光電子デバイス材料等として研究されており、ポリチオフェンはその中でも最も良く研究されているものの一つである。しかしその伝導機構には未だ不明な点も多く、キャリアの種類（キャリア濃度によって変化する）や、支配的な伝導経路（分子鎖内か？分子鎖間か？）等について活発な議論が為されている。本研究では分子鎖内と分子鎖の伝導がそれぞれどの程度伝導性に寄与しているのかを明らかにする事を目的として、高い配向性を持った regioregular poly(3-hexylthiophene) (RR-P3HT) 薄膜を作製し、角度分解光電子分光(ARPES)によるバンド分散の測定を試みた。

【実験】 薄膜の作製には摩擦転写法を用いた。これは加熱した基板にポリマーのペレットを押し付け、荷重を加えたまま掃引する手法であり、掃引方向に主鎖が揃った配向膜が作製できることが様々な共役高分子(ポリチオフェンやポリフェニレン等)で報告されている。先行研究[1]にならい、基板温度は 150℃、掃引速度は 1m/min、荷重は 30kgf/cm² の条件で ITO ガラス基板上に RR-P3HT 薄膜を作製した。作製した薄膜にスコッチテープを貼って真空チャンバーに入れ、真空中で剥離することで表面出しを行った（ARPES 測定には配向の揃った清浄表面が必要なため）。紫外光電子分光(UPS)測定は He II α 、X 線光電子分光(XPS)測定は Mg K α を励起光とし、電子エネルギー分析器は SCIENTA 社の SES 100 を用いた。

【結果と考察】 図 1 は摩擦転写の掃引方向の ARPES スペクトルである。予想されるバンド分散は殆ど見られなかった(DFT 計算による主鎖方向の分散の大きさは約 2.0 eV [2])。図 2 は同じ薄膜の角度積分 UPS スペクトルであり、その立ち上がりはフェルミ準位(E_F)から 0.5 eV である。先行研究[3]によると、ITO 基板上にスピコートによって作製した RR-P3HT は結晶性が低いが、アニールによって結晶性が増し、UPS スペクトルの立ち上がりもそれに伴い 0.16 eV から 0.53 eV に変わる。このことから、作製した薄膜は秩序構造をもっているが ARPES 測定に必要な mm オーダーの配向性はないものと考えられる。S 2p の XPS スペクトル(図 3)が明確に 2 つに分裂せず幅広いピークになっている事もこの薄膜が秩序構造を持つことを示唆している[3]。

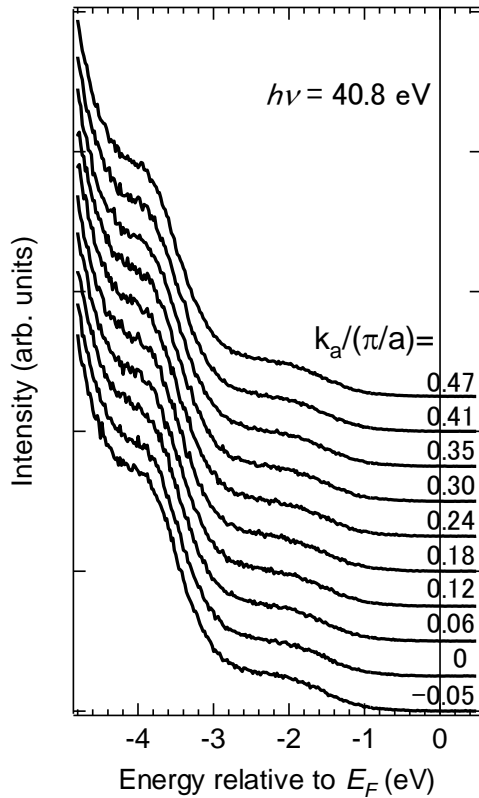


図 1 : RR-P3HT の ARPES スペクトル。

k_a は主鎖方向の波数、 $a=7.72 \text{ \AA}$ は格子定数

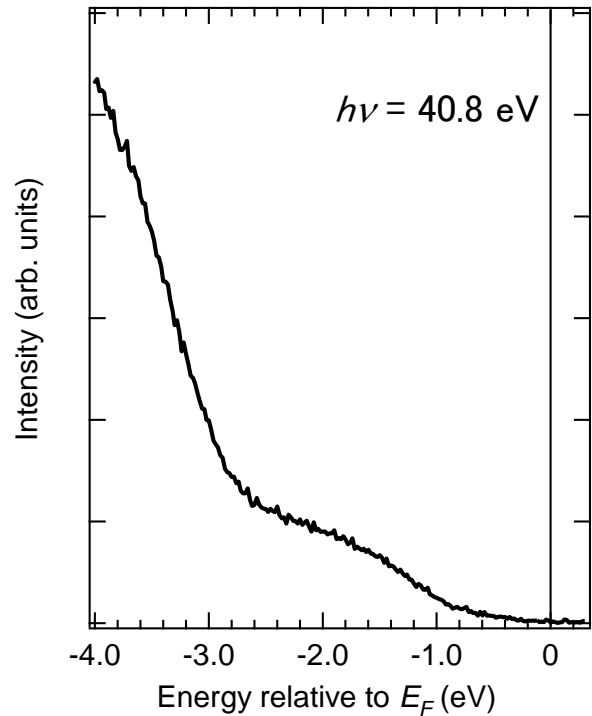


図 2 : RR-P3HT の角度積分 UPS

スペクトル

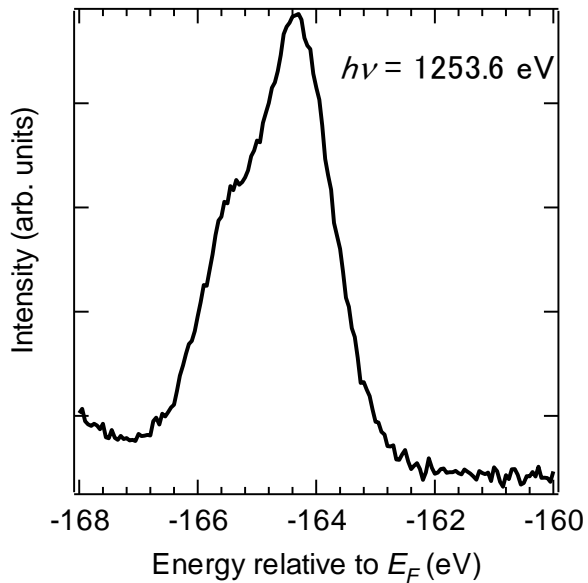


図 1 : RR-P3HT の S 2p XPS スペクトル

- [1] S. Nagamatsu *et al.*, *Macromolecules* **36**, 5252 (2003).
- [2] S. Himmelberger *et al.*, *Adv. Funct. Mater.* **25**, 2616 (2015).
- [3] K. Kanai *et al.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12**, 273 (2010).