19p-P4-7

PEDOT 系有機導電性高分子の電子構造計算によるキャリアドーピングに関する検討

Study of carrier concentration on PEDOT conducting polymers

山口大 [1]，山口東理大 [2]　○赤井 光治 [1], 阿武宏明 [2], 外園昌弘 [2], 戸嶋直樹 [2]

Yamaguchi. Univ.[1], Tokyo Univ. of Science, yamaguchi[2] ○Koji Akai[1], Akihiro Anno[2], Masahiro Hokazono[2], Naoki Toshima[2],

E-mail: akai@yamaguchi-u.ac.jp

はじめに

有機導電性高分子の熱電変換素子への応用は、加工性や大面積化、軽量化、毒性、資源量などの点において極めて魅力的である。しかし、これまで高分子系は熱電変換効率が低いとされてきた。最近、導電性高分子系において、性能子数 ZT の向上が報告されており、PEDOT 系などで ZT~0.3 程度と無機系に近い性能が得られてきている。[1,2] この PEDOT 系導電性高分子はホールドーピングが可能で、高分子系の中でも高い電気伝導率を持つ物質である。本研究では、この PEDOT 系導電性高分子に注目し、この分子構造とバンド構造の関係を電子構造計算により調べた。

計算方法

有機導電性高分子 poly (3,4-ethylene-dioxy-thiopene) (PEDOT) は絶縁体であり、PSS や Tos などの酸化剤を添加することで、ホールが注入される。注入されたキャリアーは硫黄 S と炭素 C で構成される π 共役結合に沿ってポーラロン的な伝導を示すとされている。

今回、熱電性能向上に向けた分子構造設計の可能性を検討するため、計算が容易である PEDOT 分子内にある水素の位置に対するバンド構造への影響を計算した。具体的に計算に用いた構造は図 1 に示されている。ここで、元素の種類は硫黄（黄色）、炭素（灰色）、酸素（赤色）、水素（白色）で示されている。また、電子構造計算は FLAPW 法に基づく、WIEN2k コードを用いた。

結果と考察

計算された PEDOT 分子鎖のバンド構造結果を図 1 に示す。CASE 0 が最安定構造を用いた場合であり、Kim 等の計算結果とほぼ一致する結果となった。[3] 図 1 に示されているように、キャリア伝導を担う共役結合から離れた水素（構造図において線で囲った部分に注目）の位置を移動させているにもかかわらず、バンドギャップ近くにバンドを形成しており、Fermi 準位を変化させることが分かった。このことは、PEDOT 分子に適切な置換基導入することで、バンド構造最適化やキャリア添加を効率的に行える可能性があることを示唆する。

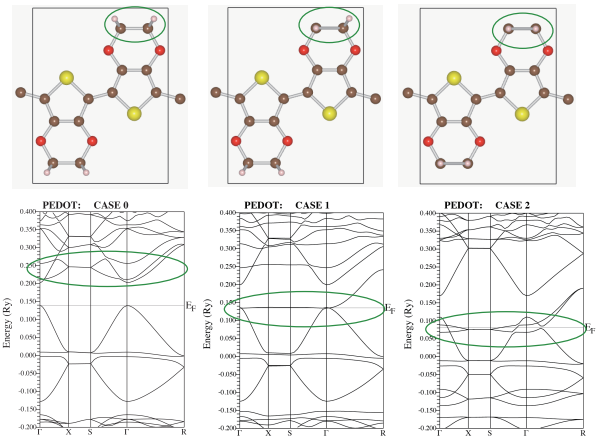

図 1: Unit cell and band structure of PEDOT.

謝辞

この研究は文科省: 地域イノベーション戦略支援プログラム（ブローバル型）「やまぐちグリーン部材クラスター事業」の支援を受けた。

参考文献

[1] Bubnova et al, Nature mat., **10** 429, (2011).

[2] Hiroshige et al., Synth. Metals **157** 467 (2007).

[3] Kim et al, J. Am. Chem. Soc., **130** 16880 (2008).

© 2013 年　応用物理学会