

## pMAIRS : 非平滑・非晶質有機薄膜デバイスの 分子配向を明らかにする新技術

**pMAIRS: A new analytical technique for quantitatively revealing the molecular orientation in an amorphous organic thin film having a surface roughness in a device**

京大化研 <sup>○</sup>長谷川健<sup>1</sup>

ICR, Kyoto Univ., <sup>○</sup>Takeshi Hasegawa

E-mail: htakeshi@scl.kyoto-u.ac.jp

**【緒言】**電子デバイスなどに利用される有機薄膜は、分子設計された化合物が期待通りの配向や結晶性を示す必要がある。作製した有機薄膜の構造を官能基単位で簡単に解析することができれば、製膜法と膜構造の相関が具体的に理解でき、構造制御した膜づくりが可能になる。従来の分光学的薄膜分析技術は、薄膜の平行多層構造を仮定した光学計算や結晶学的解析などがほとんどで、表面が荒れた薄膜や非晶質薄膜の構造解析は難しかった。デバイスの量産化を考えると、スピンコート (SC) 法やドロップキャスト (DC) 法のようなウェット法を製膜技術に採用したいが、こうした薄膜のほとんどが分光解析にとっては難敵であった。

こうした課題を克服するため、Maxwell 方程式から演繹的に導出できる考え方には限界があるとして諦め、回帰式によるスペクトル分解を測定原理にした新しい薄膜スペクトル測定技術を開発した。p 偏光多角入射分解分光 (pMAIRS) 法と名付けたこの手法は、遷移モーメントの膜面に平行・垂直な成分を、それぞれ IP および OP スペクトルとして同時に得ることができ[1], Maxwell 方程式によって帰納的に正しいことが証明済みである[2]。垂直透過光学系に翻訳した測定になる原理をもち、表面粗さに強い。また FT-IR と組み合わせて測定するため、結晶化の程度によらず分子配向を高い精度で官能基ごとに得ることができる。

**【pMAIRS 法でできること】**基板の屈折率をあらかじめ最適化済みの測定条件に組み込むことで、実際の測定の際に基板の光学定数を意識する必要はなく、一般的な有機薄膜であれば、薄膜の光学定数さえも一切気にせず定量的分子配向が実現する。また‘完全無配向’を‘54.7°配向’と明確に識別することもできる、唯一の方法でもある。

SC 法で作製した P3HT 薄膜の face-on 配向は、従来、結晶学的解析から得られた概念図で議論されてきた。しかし、溶媒の選択やアニーリングの有無によって、ほとんど非晶質の薄膜も得られた。この膜の pMAIRS スペクトルから、P3HT 分子の長軸方向はほぼ無配向になっているものの、短軸方向は高度に基板に平行な配向を保っていることを初めて明らかにした[3]。

pMAIRS 法の IP および OP スペクトルは、結晶薄膜測定 of GIXD 法と相性が大変に良く、結晶学と振動分光学的強い結びつきを可能にする方法ともいえる。

1. T. Hasegawa *Appl. Spectrosc. Rev.* **43**, 181 (2008).
2. Y. Itoh et al. *J. Phys. Chem. A* **113**, 7810 (2009).
3. N. Shioya et al. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 13472 (2015).