可視・近赤外およびラマン分光法を用いた PCPDTBT のキャリヤー解析

Study on carrier analysis of PCPDTBT using UV-VIS and Raman spectroscopy

早大先進理工, 0今井 菜月, 榎田 一平, 古川 行夫

Waseda Univ, ONatsuki Imai, Ippei Enokida, Yukio Furukawa

E-mail: ntkaui_5221_imi@ruri.waseda.jp

【背景・目的】ポリマー半導体では、アクセプタードーピングにより電 子が引き抜かれ、正電荷が分子構造変化した領域に局在し、正ポーラロン (+e、スピン1/2)や正バイポーラロン(+2e、スピン0)と呼ばれるキャリ ヤーが生成する. キャリヤーの種類と電気的特性の関係については、十 分には解明されていない. 本研究では、有機薄膜太陽電池材料として注 目されている狭バンドギャップポリマー[2,6-(4,4-bis-(2-ethylhexyl) -4H-cyclopenta-[2,1-b;3,4-b']-dithiophene) -alt-4,7-(2,1,3-benzothiadiazole)] (PCPDTBT)に対し、FeCl₃化学ドーピングとイオン液体 [1-ethyl -3-methylimidazoliumbis-(trifluoromethylsulfonyl)-imide] ([EMIM][TFSI])を 用いた電気化学ドーピングを行い、ラマン、可視・近赤外吸収分光を用 いてキャリヤーを同定し、電気伝導率と移動度を求めた.

【結果・考察】化学ドーピングに伴う PCPDTBT フィルムの吸収スペク トルの変化を Fig.1 に示した. 中性 PCPDTBT の 14500 cm⁻¹バンドは価 電子帯 (VB) から伝導帯 (CB) へのπ-π*吸収に帰属される. ドーピン グが進むと(5 min), 4000 と 8700 cm⁻¹付近に新たな吸収が観測され, そ れぞれ,正ポーラロンの電子エネルギー配置(Fig.2b)における P₁と P₂ 遷移に帰属される. さらにドーピングが進行すると (35 min), 4100 cm⁻¹ 付近の吸収が強くなり,90 min ドーピングでは1つのバンドが観測され, 正バイポーラロンの電子エネルギー配置(Fig.2c)における BP1 遷移に 帰属される. 同時にラマンスペクトルを測定し, Fig.3 に示した. スペク トルは互いに異なっており、ポーラロンとバイポーラロンでは異なる分 子構造をもつことを示している. [EMIM] [TFSI]を電解質としたトランジ スターで、電圧を変えながらラマンスペクトルを測定し、Fig.4 に示し た. Fig.3 より, 0.0 V で中性状態に帰属され, -1.35 V では正ポーラロ ンが生成されたことが分かる. 電気化学測定から, 電気伝導率と注入電 荷量を測定し、ドーピングレベルと移動度を求めた.最高移動度は、正 ポーラロンで 4.8×10^{-3} cm² V⁻¹ s⁻¹ (2.3 mol%/π電子) であり、小さな値 であった.



Fig.2 Electronic configurations





