

研究 成 果 報 告 書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB		MAIR 分光法を利用した有機薄膜太陽電池の分子配列解析と制御			
研究テーマ (欧文) AZ		Structural analysis and control of an organic thin film of solar cell using MAIR spectroscopy			
研究氏 代 表 名 者	カナ CC	姓)ハセガワ	名)タケシ	研究期間 B	2012 ~ 2013年
	漢字 CB	長谷川	健	報告年度 YR	2013年
	ローマ字 CZ	Hasegawa	Takeshi	研究機関名	京都大学
研究代表者 CD 所属機関・職名		京都大学化学研究所・教授			
概要 EA (600 字～800 字程度にまとめてください。) ポリ-3-アルキルチオフェン(P3AT)は、チオフェン環が直鎖状に連なる一次構造もち、3 位にアルキル鎖を側鎖としてもたせた高分子で、チオフェン環が all-trans コンフォメーションで連なると長距離の共役二重結合が実現する。このため可視光による電子励起が可能で、太陽電池の中核を担う電子供与体(p 型)として機能する代表的な有機半導体となる。有機半導体は励起子半径が小さいため、電極への電荷移動を効率よく行うには薄膜化が必要で、大量生産と配向化を考慮するとスピコート法が最も有力な薄膜化法である。しかしこれまで、製膜した薄膜中での官能基単位での分子配向や側鎖のコンフォメーションを具体的に明らかにした研究が非常に少なく、具体的な描像を得る手段が確立されていなかった。本研究では、膜面に平行・垂直な分子配向を容易に議論可能な赤外 MAIRS 法を導入し、未解明な膜構造を系統的に明らかにすることを試みた。 側鎖にヘキシル基を導入した P3HT を題材に、スピコート法でシリコン基板上に製膜した。クロロホルム(Chl)溶液およびトリクロロベンゼン(TCB)溶液を用いることで、製膜後の分子配向に違いが出ることが知られており、これをまず確かめた。Chl 溶液から製膜すると、膜にした直後に溶液(オレンジ色)とは異なる紫色に変化し、基板上でチオフェン環が平面的に並び、共役長が伸びたことが目視でも確認できた。一方、TCB 溶液から製膜すると製膜後に色が変化するのに 10 分ほどかかり、TCB の揮発が非常に遅いことが分子の並びに影響することが期待された。 これらの薄膜を赤外 p-MAIRS 法で測定したところ、Chl および TCB 由来では大きく異なる結果を与えた。すなわち、820 cm^{-1} のバンドが Chl 由来では OP スペクトルに強く現れ、TCB 由来では IP スペクトルに強く現れた。すなわち、Chl 由来ではチオフェン環が face-on 配向するのに対し、TCB 由来では edge-on 配向することを明確に示し、従来から指摘されてきた結果をより鮮明に測定できることがわかった。また分子配向角も簡単に決めることができた。さらに、C-H 伸縮振動領域の解析から側鎖のコンフォメーションの変化も初めて具体的に理解することに成功した。					
キーワード FA	アルキルチオフェン	太陽電池	分子配向	赤外 MAIRS 法	

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード TA					研究課題番号 AA								
研究機関番号 AC					シート番号								

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）										
雑誌	論文標題 ^{GB}	Analysis of Molecular Orientation and Conformation of Poly(3-hexylthiophene) Thin Films on Silicon by Infrared p-Polarized Multiple-Angle Incidence Resolution Spectrometry								
	著者名 ^{GA}	N. Shioya, T. Shimoaka, and T. Hasegawa	雑誌名 ^{GC}	Chemistry Letters						
	ページ ^{GF}	1198~1120	発行年 ^{GE}	2	0	1	4	巻号 ^{GD}	43	
雑誌	論文標題 ^{GB}	Stratified Dipole-Arrays Model Accounting for Perfluoroalkyl Compounds-Specific Bulk Properties								
	著者名 ^{GA}	T. Hasegawa, T. Shimoaka, N. Shioya, K. Morita, M. Sonoyama, T. Takagi, T. Kanamori	雑誌名 ^{GC}	ChemPlusChem						
	ページ ^{GF}	~	発行年 ^{GE}	2	0	1	4	巻号 ^{GD}	79	
雑誌	論文標題 ^{GB}	Surface Selection Rule of Infrared Diffuse Reflection Spectrometry for Analysis of Molecular Adsorbates on a Rough Surface of a Non-Absorbing Medium								
	著者名 ^{GA}	S. Morimine, S. Norimoto, T. Shimoaka, and T. Hasegawa	雑誌名 ^{GC}	Analytical Chemistry						
	ページ ^{GF}	4202~4208	発行年 ^{GE}	2	0	1	3	巻号 ^{GD}	86	
図書	著者名 ^{HA}									
	書名 ^{HC}									
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}		
図書	著者名 ^{HA}									
	書名 ^{HC}									
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}		

欧文概要^{EZ}

Poly-3-alkylthiophene (P3AT) is a linear polymeric compound consisted of thiophene rings, each of which hangs an alkyl chain. When the rings are arranged in a plane, a long conjugated double bond is formed, which absorbs visible light to be electronically excited to be an electron donor in a solar cell. Since an organic semiconductor has a very small exciton radius, the compounds should be arranged in a thin film to transfer an electron to the electrode. The spin-coating technique is one of the most useful techniques to have oriented molecules in a thin film on a solid substrate. Thus far, however, the molecular orientation and conformation have long been unclear. In the present study, infrared multiple-angle incidence resolution spectrometry (IR MAIRS) has been employed to reveal both the orientation and conformation in a thin film.

For the study, Infrared (IR) p-polarized multiple-angle incidence resolution spectrometry (p-MAIRS) has first been employed to reveal the molecular orientation in two different poly(3-hexylthiophene) (P3HT) thin films that have the face-on and edge-on orientations. The C-H out-of-plane deformation vibration mode (ca. 820 cm^{-1}) of the thiophene ring is found to be highly localized on the ring, which is quite useful for the molecular orientation analysis coupled with IR p-MAIRS. On the other hand, the C-H stretching vibration region is useful to discuss the molecular order, conformation and folding of the hexyl chain via the MAIRS dichroism.