

実験報告書様式(一般利用課題・成果公開利用)

(※本報告書は英語で記述してください。ただし、産業利用課題として採択されている方は日本語で記述していただいても結構です。)

 MLF Experimental Report	提出日 Date of Report
課題番号 Project No. 2012A0078 実験課題名 Title of experiment 塗布型高分子系有機薄膜太陽電池の高性能化に向けた逆構成デバイス構造解析 実験責任者名 Name of principal investigator 鈴木拓也 所属 Affiliation 三菱化学科学技術研究センター	装置責任者 Name of responsible person 山田悟史 装置名 Name of Instrument/(BL No.) Soft Interface Analyzer (SOFIA) / BL 16 実施日 Date of Experiment 2012/06/18～2012/06/20

試料、実験方法、利用の結果得られた主なデータ、考察、結論等を、記述して下さい。(適宜、図表添付のこと)
 Please report your samples, experimental method and results, discussion and conclusions. Please add figures and tables for better explanation.

1. 試料 Name of sample(s) and chemical formula, or compositions including physical form.
<ul style="list-style-type: none"> ▪ poly-3-hexylthiophene (P3HT), C10H14S ▪ Indene-C60 bis-adduct (ICBA), C78H16

2. 実験方法及び結果 (実験がうまくいかなかった場合、その理由を記述してください。) Experimental method and results. If you failed to conduct experiment as planned, please describe reasons.
--

Reference 用の glass、glass/ITO、glass/ITO/ZnO 膜および測定用の glass/ITO/ZnO/P3HT:ICBA (P3HT:ICBA =1:1)膜を準備した。glass/ITO/ZnO/P3HT:ICBA 膜はアニール無しおよびアニール 140°Cの2種類である。各試料に、波長 0.2 ~ 0.88 nm の中性子を入射角 0.45°、0.80°、および 1.50° にて照射し、time-of-flight 法より中性子反射率データを得た。試料面に垂直な成分の散乱ベクトル Q_z に対する反射率プロファイルを導出し Fitting 解析した。

図1に、Reference 用薄膜の反射率プロファイルとフィッティング結果を示す。実線がフィッティング結果である。縦軸はオフセット済みである。glass、glass/ITO、glass/ITO/ZnO、各成分に一層モデルを仮定することで良好なフィッティング結果を得た。

図2に glass/ITO/ZnO/P3HT:ICBA 薄膜の反射率プロファイルとフィッティング結果を示す。実線がフィッティング結果である。縦軸はオフセット済みである。活性層に3層モデルを仮定することで良好なフィッティング結果を得た。

図3にフィッティングより見積もられた glass/ITO/ZnO/P3HT:ICBA 薄膜の散乱長密度プロファイルを示す。ここで、P3HT および ICBA の理論上の散乱長密度は、それぞれの質量密度を 1.1g/cm^3 、 1.5g/cm^3 と仮定した場合、0.7 および $4.4 \times 10^{-6} \text{Å}^{-1}$ である。またポアが存在すると仮定した時のポアの散乱長密度は $0 \times 10^{-6} \text{Å}^{-1}$ である。したがって、活性層/ZnO 界面における 20~30nm 程度のギャップ層は、界面近傍におけるポアの増大またはフラーレンの欠乏を示唆している。アニールにより、活性層における厚みが 200nm 程度の均一層の濃度分布は変化せず、表面/界面において濃度分布に変化が生じていることが示唆された。表面に関しては、散乱長密度の勾配が緩やかになっているのが特徴的である。これは、アニールによる表面ラフネスの増大または深さ方向の p/n 比の濃度分布勾配の増大が生じていることを示唆している。

さらに、アニールをしていない試料に関して、入射角 0.45° において、昇温下での in-situ 測定を 60、80、100、120、140、160°Cにて行った。結果に関しては、現在は反射率プロファイルの解析に至っていない。理由として、入射角が1点であるため Q_z 範囲が狭く、解析に足るデータが得られていない可能性が考えられる。In-situ 昇温実験は今後の課題であり、より大きな試料を準備し、加速器出力の高い条件下で実験を行うことで、測定時間を短縮することによって、解析に足る広い Q_z 範囲のデータを取得できると考える。

また、今回測定した試料を XR 測定および Spring8 にて GI-SAXS 測定することで、深さ方向のより詳細な濃度分布およびナノスケールでの構造情報を得る予定である。

2. 実験方法及び結果(つづき) Experimental method and results (continued)

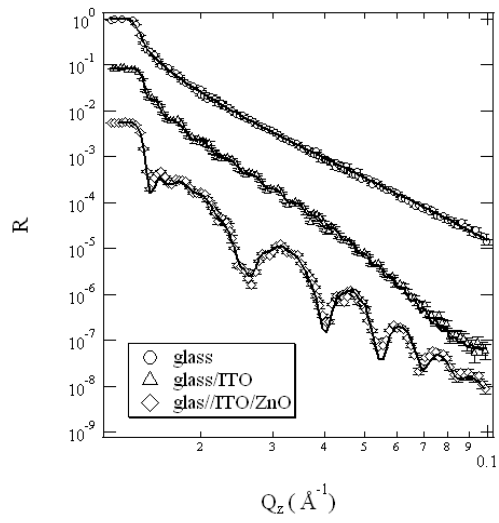


図1; Reference 用薄膜の反射率プロファイルとフィッティング結果

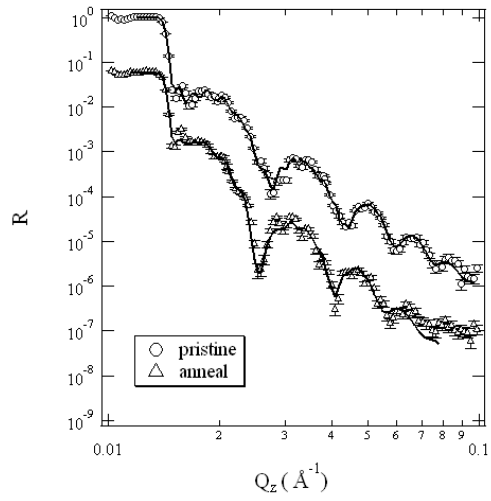


図2; glass/ITO/ZnO/P3HT:ICBA 薄膜の反射率プロファイルとフィッティング結果

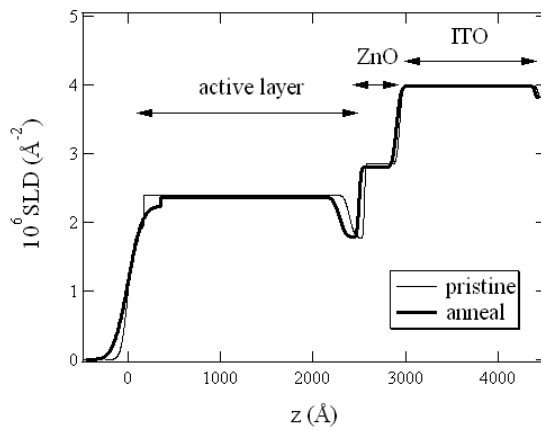


図3; フィッティングより見積もられた glass/ITO/ZnO/P3HT:ICBA 薄膜の散乱長密度プロファイル