

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。 )

 <b>MLF Experimental Report</b>	提出日 Date of Report 2012年5月25日
課題番号 Project No. 2011B0008 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 2012/03/12 ~ 2012/03/14

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"> <li>・ poly-3-hexylthiophene (P3HT), C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>S</li> <li>・ [6,6]-Phenyl-C61-Butyric Acid Methyl (PCBM), C<sub>77</sub>H<sub>9</sub>O<sub>2</sub></li> </ul>

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.
--

アニール温度の異なる4種の P3HT/PCBM 薄膜、および、アニールなしで活性層の上にバッファー層と電極を積層した薄膜試料を準備した。アニール温度は室温、120, 150, 180 °、P3HT:PCBM=1:1(wt%)、基板は Si 基板である。P3HT/PCBM 薄膜試料に、波長 0.2 ~ 0.88 nm の中性子を入射角 0.30 ° および 1.0 ° 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、アニールなし(室温)条件のP3HT/PCBM薄膜の反射率プロファイル、図2にFittingから求めた深さ方向の散乱長密度プロファイルを示す。 $z=0\text{nm}$ が表面(空気界面)、 $z=100\text{nm}$ がSi基板界面である。3層モデルを仮定することで良好なFitting結果が得られた。P3HT、PCBMの散乱長密度はそれぞれ  $6.8 \times 10^{-6}\text{nm}^{-1}$ 、 $4.3 \times 10^{-5}\text{nm}^{-1}$ <sup>[1]</sup>であることから、表面近傍の約 20nmの層は、P3HTリッチ層または表面の凹凸層を反映すると考えられる。表面から 20nm ~ 94nm付近の均一な層は、P3HTとPCBMから成る均一な層に対応すると考えられる。基板付近の数nmの層は、基板表面のSi酸化膜を現すと考えられる。

その他の試料に関しては、測定・解析に十分に適した試料を準備し実験を行うことができなかった。ビームのサイズ(フットプリント)および加速器出力に関して正確な情報を入手しなかったために、測定に大幅な時間を要したことが原因である。今回の測定により、中性子反射率法における試料準備・実験・解析に至る概略を掴むことができたため、次回の測定では、上記の問題を改善できる見込みである。

[1] *Soft Matter*, 2011, 7, 9276–9282

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

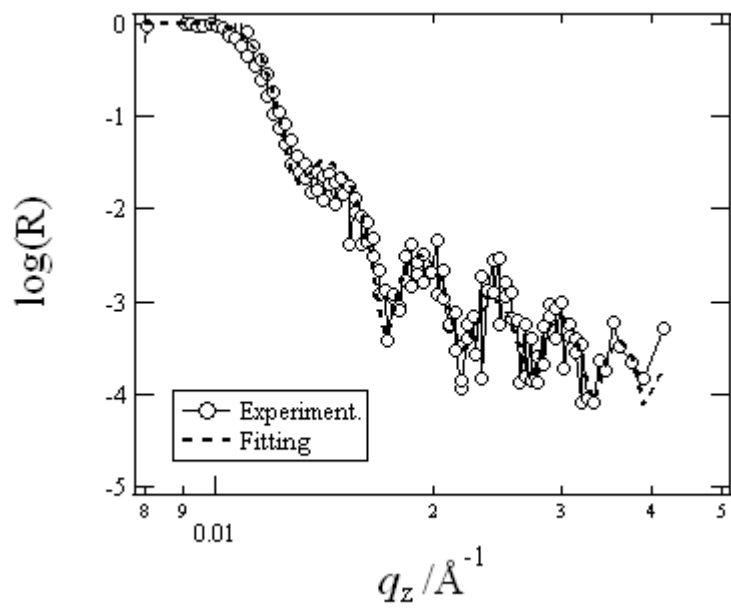


図1; アニールなし(室温)条件の P3HT/PCBM 薄膜の反射率プロファイル

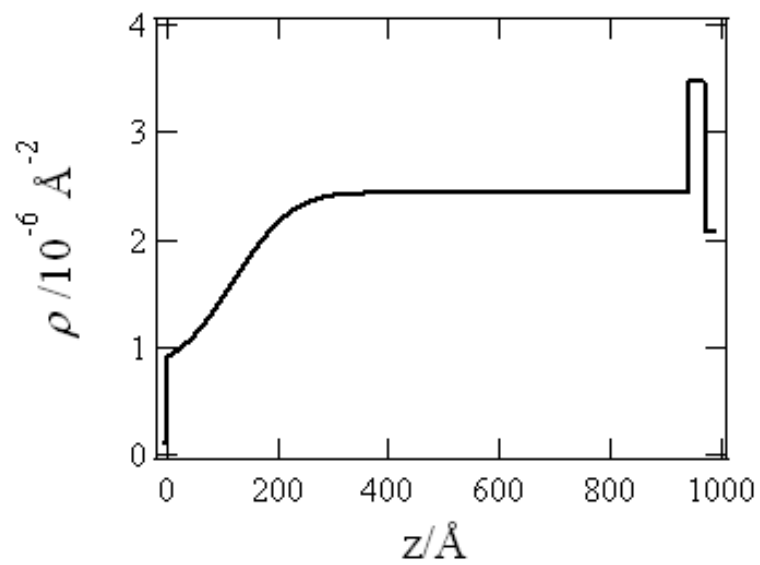


図2; Fitting から求めた深さ方向の散乱長密度プロファイル