

結果および考察：

DRCN5T-HH の単膜及び PC₆₁BM 混合膜の各 GIWAXS 像を図 2(a), (b) に、GIWAXS 像の面外、面内方向の積分プロファイルを図 3 に示す。単膜及び PC₆₁BM 混合膜どちらにおいても、結晶の長距離秩序構造に由来する複数の高次(h00)面の回折ピークが観測された。また単膜では、面内方向に DRCN5T-HH (010)面の回折ピークがみられることから、DRCN5T-HH は π - π スタッキングしており、基板に対して edge-on に配向していることが分かった。一方 PC₆₁BM 混合膜では、面外方向に DRCN5T-HH (010)面の回折ピークがみられることから、DRCN5T-HH は基板に対して face-on に配向していることが分かった。

次に DRCN5T-TT の単膜及び PC₆₁BM 混合膜の各 GIWAXS 像を図 2(c), (d) に、GIWAXS 像の面外、面内方向の積分プロファイルを図 3 に示す。DRCN5T-HH の GIWAXS 像で現れた様な結晶の長距離秩序に由来する回折ピークは PC₆₁BM 混合膜でしか観測されず、単膜中において DRCN5T-TT はアモルファスであることが分かった。一方 PC₆₁BM 混合膜では、面内方向における DRCN5T-TT (010)面の回折ピークから、DRCN5T-TT は π - π スタッキングしており、基板に対して edge-on に配向していることが分かった。

以上のことから、DRCN5T-HH と DRCN5T-TT について、薄膜中での結晶性、配向性が異なることが分かった。これは、アルキル基の位置の差異により薄膜中での分子のコンフォメーションが変わってくるためだと考えられる。

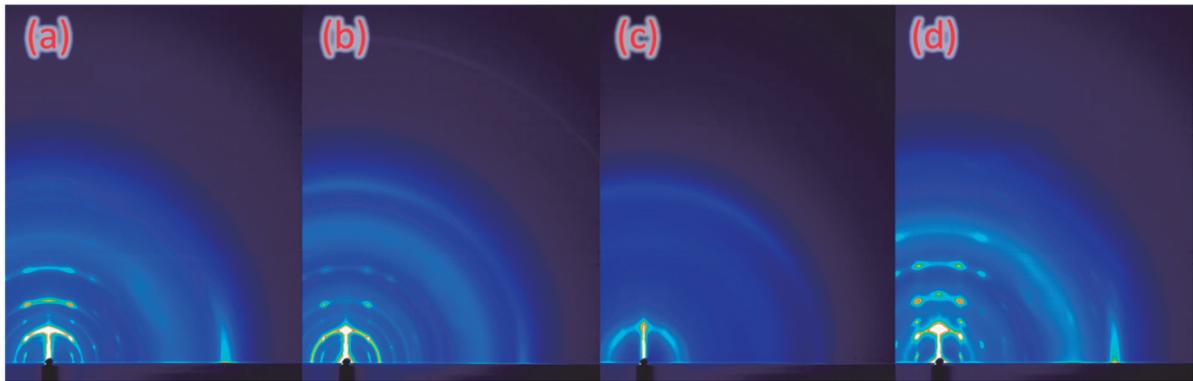


図 2. GIWAXS 像。左から (a) DRCN5T-HH 単膜、(b) DRCN5T-HH:PC₆₁BM 混合膜、(c) DRCN5T-TT 単膜、(d) DRCN5T-TT:PC₆₁BM 混合膜

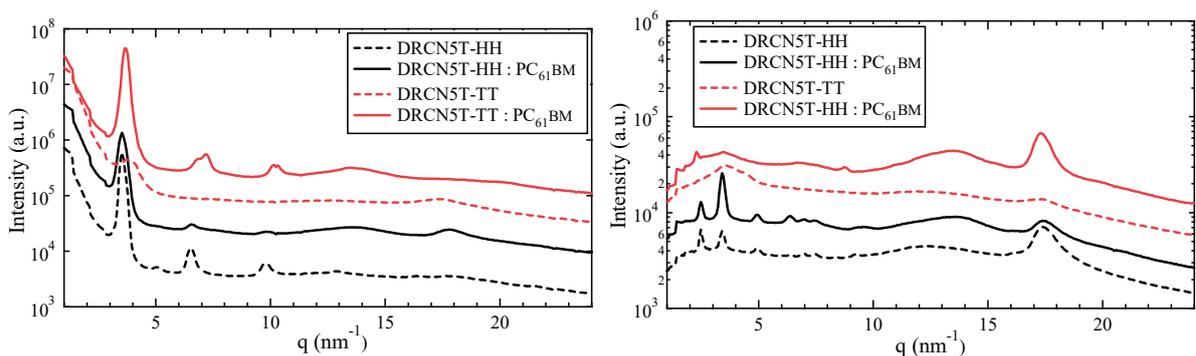


図 3. GIWAXS 像積分プロファイル。左：面外方向プロファイル、右：面内方向プロファイル

課題：

今回、測定材料として DRCN5T-HH (DRCN5T) と DRCN5T-TT を用いた。しかし、DRCN5T のアルキル基の位置が異なるパターンの化合物は数種類存在する。今後は、体系的な実験により DRCN5T のアルキル基の位置と薄膜中での結晶状態との相関を解明していきたい。

参考文献：

[1] B. Kanet et al., *J. Am. Chem. Soc.* 137, 3886 (2015).