

研究レビュー

(1) Na ドーピングされたポリパラフェニレン中の負ポーラロンと負バイポーラロンのラマンスペクトルに関する密度汎関数法に基づいた研究

p-ターフェニルから *p*-セキシフェニルの中性，ラジカルアニオン，ジアニオン種の基準振動計算を密度汎関数法（BLYP/6-31G*レベル）で行った．図 1 に *p*-セキシフェニルのラジカルアニオンの幾つかの振動モードを示した．計算結果に基づいて，Na でドーピングされたポリパラフェニレン中の負ポーラロンと負バイポーラロンのラマンスペクトルの帰属を行った．その結果，負ポーラロンまたは負バイポーラロンに由来するラマンバンドは，それらの生成に伴う局在モードとして説明された．負ポーラロンと負バイポーラロンに特徴的な振動を見いだすことができた．ベンゼン核間の CC 伸縮振動の振動数は，負ポーラロンや負バイポーラロン生成に伴うベンゼノイドからキノイド構造の変化に鋭敏である．
A-1. *J. Phys. Chem. A*, **106**, 3587 (2002).

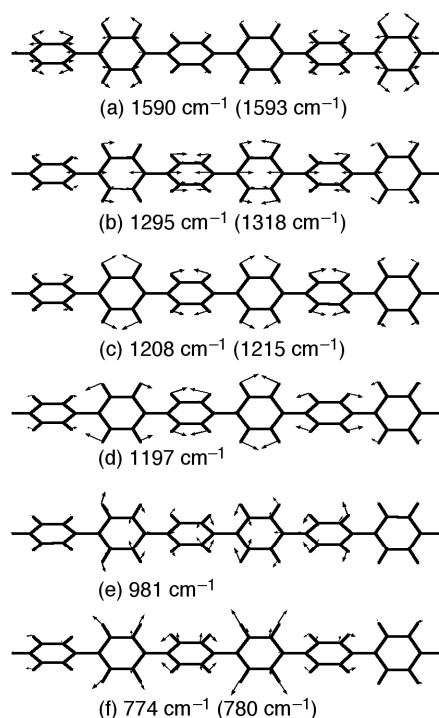


図 1

(2) 電界発光性共役高分子の赤外分光

MEH-PPV を材料とした発光ダイオードと金属・絶縁体・半導体デバイスの赤外スペクトルを *in situ* 赤外反射吸収法により測定した．これらの電子デバイスの電圧誘起赤外スペクトルを FT-IR 差スペクトル法により測定した．観測された赤外バンドは，MEH-PPV 層に注入されたキャリアの振動に帰属された．MEH-PPV 発光ダイオードの電圧誘起赤外吸収スペクトル（図 2a）は，ヨウ素ドーピングにより生成した正キャリアのスペクトル（図 2b）に類似しており，Na ドーピングにより生成した負キャリアのスペクトル（図 2c）とは異なっており，電圧を印加した定常状態では，正キャリアが多く存在しているといえる．この結果は，MEH-PPV 発光ダイオードの発光効率が低い原因の一つは，キャリアバランスが悪いことである可能性を示している．金属・絶縁体・半導体デバイスでは，電界効果により生成したキャリアの赤外スペクトルを初めて測定することができた．*In situ* 赤外反射吸収測定法は，有機電子デバイスの機能を担うキャリアに関する知見を与える実験法として有用であることを示した．

A-4. *Macromol. Symp.*, **184**, 99 (2002).

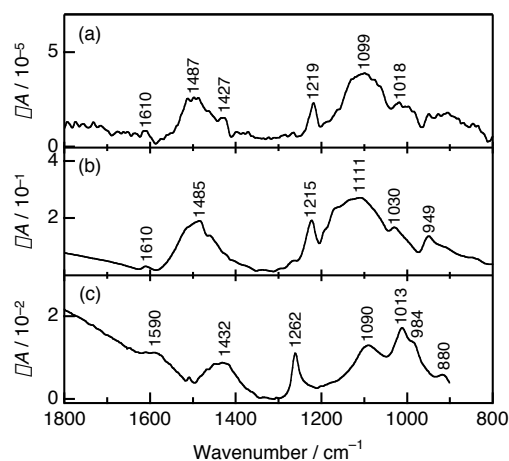


図 2