



XAFSによるC₆₀・MoO₃複合薄膜の局所構造分析

小川 智史, 山本 駿, 中谷 真人
名古屋大学大学院工学研究科エネルギー理工学専攻

キーワード：フラーレン (C₆₀), MoO₃ ナノクラスター, 熱電材料, XAFS

1. 背景と研究目的

フラーレン (C₆₀) はその特異な分子構造と電子状態などからこれまで精力的に研究されてきており、近年は、柔らかい太陽電池や熱電材料などの次世代フレキシブルデバイスへの応用が期待されている。特に C₆₀ 薄膜は N 型の非常に大きなゼーベック係数 S を示し、かつ柔軟性に富むことから人体装着型センサー用の独立電源としての応用が期待されている。C₆₀ 薄膜の実用化のためには、キャリア密度制御により低い電気伝導度 σ の向上が不可欠であるが、大気中で高い安定性を有する C₆₀ 薄膜用ドーパントは報告例が殆どない。これまで中谷らは、(MoO₃)_n ナノクラスターが C₆₀ 薄膜に対して P 型ドーパントとして機能すること、及び、MoO₃ をドーブされた C₆₀ 薄膜が高い熱的安定性を示すことなどを走査トンネル顕微鏡、四探針電気伝導測定、及び DFT 理論計算を基に明らかにしてきた[1]。一方で、理論計算の結果からは、MoO₃ ナノクラスターの構造や化学状態がドーパントとしての性質に大きく影響することも示唆されており、C₆₀ 薄膜の電気特性を再現性良く精密制御するためには、その詳細な理解と制御方法の開発が必要不可欠である。本研究では C₆₀ 薄膜中 MoO₃ ナノクラスターの Mo 周りの局所構造分析および Mo の荷電状態解析を目的として、Mo K-edge XAFS を測定する。配位環境の立体情報や価数が得られる XANES と配位数や結合距離などの定量分析が可能な EXAFS から MoO₃ ナノクラスターの構造情報を取得することを目的とする。

2. 実験内容

C₆₀・MoO₃ 複合薄膜は高真空下におけるガラス基板への共蒸着によって作製した。C₆₀・MoO₃ 複合薄膜の Mo K-edge XAFS 測定はあいちシンクロトロン光センターの BL5S1 にて蛍光収量法によって実施した。

3. 結果および考察

図 1 に C₆₀・MoO₃ 複合薄膜の Mo K-edge XANES スペクトルを示す。比較のために標準試料の MoO₃ 粉末を透過法によって測定したスペクトルを示す。すべてのスペクトルはエッジジャンプで規格化されている。2つのスペクトルを比較すると概観がよく似ていることから、複合薄膜中の MoO₃ の局所構造に大きな差異はないと考えられるが、多少の差異は見られるため、より詳細な分析から構造情報を引き出せる可能性がある。

4. 参考文献

[1] M. Nakaya *et al.*, *J. Chem. Phys.* **158**, 054701 (2023).

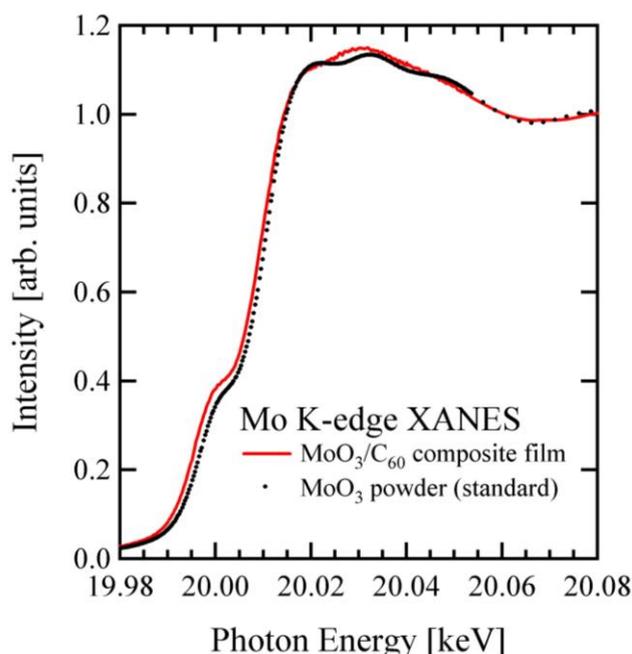


図 1. C₆₀・MoO₃ 複合薄膜の Mo K-edge XANES スペクトル。