

行政院國家科學委員會專題研究計畫 成果報告

發光高分子在壓力下的光學特性研究(3/3)

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC93-2112-M-032-001-

執行期間：93年08月01日至94年12月31日

執行單位：淡江大學物理學系

計畫主持人：楊淑君

報告類型：完整報告

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 95 年 5 月 8 日

(一) 計畫中文摘要

關鍵詞：發光高分子，光學特性，電子特性，壓力

本計畫主要將探討有機材料本身的結構對其電子特性的影響。共軛發光高分子的光、電物理性質由其主鏈上之非定域 (delocalized) 的 π 電子結構所主宰。根據量子化學的計算，分子間的交互作用對共軛發光高分子的光電特性有很大的影響，而由有機材料製成的薄膜的特性也會受影響，進而影響有機光電元件的品質。因此有機材料本身的結構究竟會如何影響其電子特性在有機光電元件的製造上相當重要。

材料本身的結構直接決定了其分子間或分子內部原子的交互作用。一般而言，改變這些交互作用最直接的方法便是改變材料的化學結構；但如此的改變在發光高分子上是不容易的，而且很有可能破壞材料，使得它不再具有發光的特性。利用金鋼石壓力砧 (diamond anvil cell) 對發光高分子加均方壓 (hydrostatic pressure)，既不需改變材料的化學結構，又可有效地改變其分子形狀進而影響分子間或分子內部原子的交互作用及其電子特性，為一個方便又可信賴的系統式研究。

本計畫將藉著施壓於發光高分子，以改變材料本身之分子或原子間的距離，調整其高分子鏈的結構與電子特性，因而產生新的基態 (ground state) 或相變。本計畫將藉由研究發光高分子的各種光學特性，包括吸收光譜 (absorption spectrum)、螢光光譜 (photoluminescence spectrum)、光致吸收光譜 (photo-induced absorption spectrum)、特別是拉曼散射 (Raman scattering)，在高壓下的變化，以探討材料本身的結構對其電子特性的影響。

(二) 計畫英文摘要

Keyword: luminescent polymer, optical properties, electronic properties, hydrostatic pressure

This proposal is going to investigate the effect of the structure of organic materials to their electronic properties. Conjugated luminescent polymers are characterized by highly delocalized π -electronic structure along the polymer backbone. Quantum-chemical calculations have shown that inter-molecular interactions strongly affect the electronic and optical properties of conjugated luminescent polymer, as well as the organic thin film quality. Thus, the performance of the opto-electronic devices made by these materials will also depend on it. How the material structure changes the electronic properties of organic materials is truly important on making organic opto-electronic devices.

The inter- and intra-molecular interactions are determined by the structure of materials. In general, changing in chemical structure of a material could result in changing its inter- and intra-molecular interactions. However, it is difficult to modify the chemical structure of a luminescent polymer. Besides, the modification in structure is very possible to destroy the polymer and make it no longer luminescent. The application of hydrostatic pressure in a diamond anvil cell is an efficient way to modify the polymer structure without changing their chemical structure. Applying pressure can tune the inter- and intra-chain interactions and provides a convenient and reliable way of systemically study.

In this proposal we plan to introduce the pressure to luminescent polymers to change the distances between the polymer chains, and therefore to tune the structural and electronic properties, which can lead to new ground states and/or structural phase transitions. We plan to study the optical properties, such as absorption spectrum, photoluminescence spectrum, photo-induced absorption spectrum, and Raman scattering, of luminescent polymers under hydrostatic pressure to discover the effect of the structures of polymers to their electronic properties.

(三) 報告內容

前言

測量凝態物質的光譜已被承認是對探測凝態物質的電子能態結構和晶格特性的一種有效的方法；對於研究凝態物質的物理特性及結構而言，壓力是一個重要的變數，藉著施壓於物質，材料本身之分子或原子間的距離得以改變，進而影響其分子或原子間的交互作用，因而產生新的基態 (ground state) 或相變。因為金剛石的透明性及堅硬度，使金鋼石壓力砧 (diamond anvil cell) 成為對樣品加壓並測量樣品的光學特性一個有力的工具。

研究目的

共軛發光高分子的光、電物理性質由其主鏈上之非定域 (delocalized) 的 π 電子結構所主宰 [1]。根據量子化學的計算，分子間的交互作用對共軛高分子的光電特性有很大的影響 [2][3]。本計畫預期建立一套由測量發光高分子在高壓下的各種光學特性的變化，研究分子間及分子內的交互作用對共軛高分子的光、電物理性質所產生的影響，希望有助於共軛高分子的進一步研究，進而對有機光電元件的製作有所助益。

研究方法

本計畫主要是藉由研究發光高分子的各種光學特性，包括光吸收光譜 (absorption spectrum)、螢光光譜 (photoluminescence spectrum)、光致吸收光譜 (photo-induced absorption spectrum)、特別是拉曼散射 (Raman scattering)，在高壓下的變化，以探討材料本身的結構對其電子特性的影響。藉著金鋼石壓力砧可均勻施壓於發光高分子 (luminescent polymer) 上，在不需改變材料本身的化學構造的情況下改變材料分子或原子間的距離，以調整高分子鏈與鏈之間的交互作用，進而影響其電子特性；並且當壓力被釋放後，材料本身即可恢復其原狀態，使我們可以重覆使用同一材料於不同的實驗，方便我們對材料作有系統的研究。

本計畫預計用三年的時間來執行，預期在三年內建立一套高解析度的光譜測量系統。本計畫之預定進度如下：

第一年計畫先購買分光儀、CCD 偵測器和金鋼石壓力砧，再向其他實驗室商借小功率的雷射，先架設、熟悉整個系統和金鋼石壓力砧的操作，並對一些樣品作初步測量，以做為系統調整的參考。

第二年再購買高功率雷射，重新調整系統，測量發光高分子在壓力下的吸收光譜、螢光光譜、拉曼散射。

第三年除繼續上一年的研究外，希望建立能測量微弱的光致吸收光譜的系

統，研究發光高分子在壓力下的光致吸收光譜；分析所有實驗數據，利用本系原有的計算系統預測發光高分子在高壓下的特性，與實驗對照。

結果與討論

本實驗室已按原計畫申請內容於計畫執行期間購買了單光儀、雷射、金鋼石壓力砧和光電倍增管等設備，並配合其他的經費來源所購置之 CCD 等儀器，目前已架設好一組可以測量螢光光譜和拉曼散射光譜的系統；並且可以對樣品施加壓力至 100 kbar，以觀測壓力對樣品結構和其光學特性的影響。截至目前為止，我們已完成了幾個有機高分子在壓力下的拉曼散射的實驗，有一位碩士班研究生因參與這項研究而完成其碩士論文 [4] 並獲得學位。相關的實驗結果也已寫成論文，發表於 2005 年十二月出版的 *Tamkang Journal of Science and Engineering* 學術期刊(EI)內 [5]。除此之外，本實驗室目前正在進行有機高分子在壓力下的螢光光譜的實驗，預計在六個月內會有完整的結果，屆時將再和已得到之相關拉曼散射的資料對照，希望能有更具體的結論。

- [1]. R.E. Peierls, *Quantum Theory of Solids*, Oxford University Press, London, 1955.
- [2]. N.S. Sariciftci, *Primary Photoexcitations in Conjugated Polymers: Molecular Exciton Versus Semiconductor Band Model*, World Scientific, Singapore, 1996.
- [3]. J. Cornil, A.J. Heeger, and J.L. Bredas, *Chem. Phys. Lett.* **272**, 463 (1997).
- [4]. “有機高分子 PMMS 在高壓下的拉曼散射特性”，蔡尚崎，淡江大學碩士論文。
- [5]. “Pressure Dependence of Raman Scattering in Poly-methyl Stilbenemethacrylate”, Shang-Chi Tsai, Shu-Chun Yang and Shu-Mei Chang, *Tamkang Journal of Science and Engineering*, v.8, n.4, pp. 267-272 (2005).

(四) 計畫成果自評

本計畫預計用三年的時間來執行，預期在三年內建立一套高解析度的光譜測量系統。本計畫今年度之預定進度和目前之實際進度已於“報告內容”部分分別詳細敘述。本人認為至目前為止，本計畫之研究內容與進度和原計畫相符合；但由於經費的限制，目前只能夠測量樣品在常溫 and 不同壓力下的螢光光譜和拉曼散射光譜，發表的相關論文也已於“報告內容”之“結果與討論”部分詳細敘述。本人希望藉由今年度和下年度的計畫經費，可以完成低溫系統的架設，並建立可以測量樣品其他光學特性的系統，以期與螢光光譜和拉曼散射光譜交互對照，而有完整的結論。