

전도성 고분자에서의 솔리톤

Soliton

목차

- 들어가며
- 전도성 고분자 연구의 역사
- 전도성 고분자의 전자적 구조
- 전도성 고분자의 전기적 특징
- 전도성 고분자의 응용분야

들어가며

- 왜 고분자를 연구하는가?
 - 가공하기 쉽고, 가볍고, 싸다
- 고분자를 이용한 전기소자는
 - 쉬운 제조 공정
 - 낮은 생산 가격
 - 다양한 기판의 사용 가능성
 - 분자 설계를 통해 energy band gap 조절

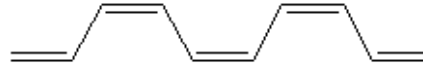
전도성 고분자 연구의 역사

- 1970년 폴리에스틸렌 필름
- 1977년 할로젠 원소 도핑
- 1990년 도핑을 하지 않은 고분자
- 고분자를 이용한 박막 트랜지스터
- 분자 전자소자, 분자 자석, 나노섬유

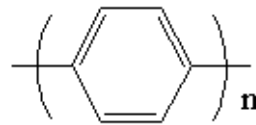
Conducting Polymers



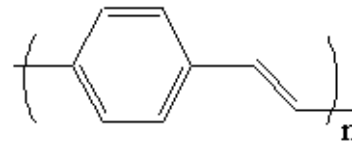
trans-(CH)_x



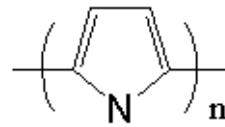
cis-(CH)_x



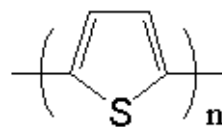
poly(p-phenylene)
PPP



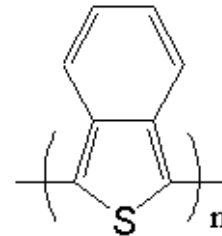
poly(p-phenylenevinylene)
PPV



polypyrrole
PPy



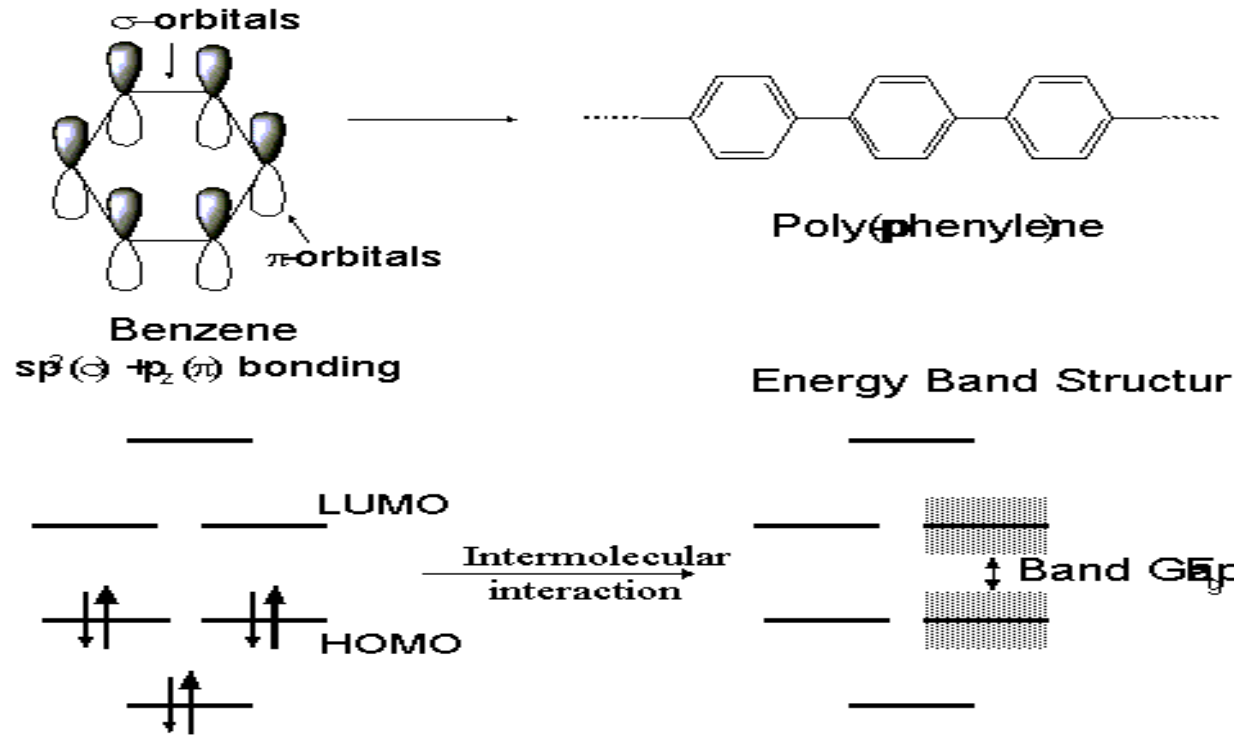
polythiophene
PT



polyisothianaphthene

전도성 고분자의 전자적 구조

- PPP



- 분자 궤도는 중첩하여 에너지 띠를 형성

전도성 고분자의 전자적 구조

- 아주 긴 고분자 사슬에서는 결합길이가 길고 짧은 것이 반복되는 상태가 더 안정
- Fermi surface에서 에너지 띠 간격이 생기고 Metal-insulator transition 발생

Metal-insulator transition

- 금속성은 partially filled band를 가진 물질에서 관찰된다
- Partially filled band를 가지지만 절연체인 물질들은 전자와 전자의 상호작용에 의해 band가 나뉘기 때문

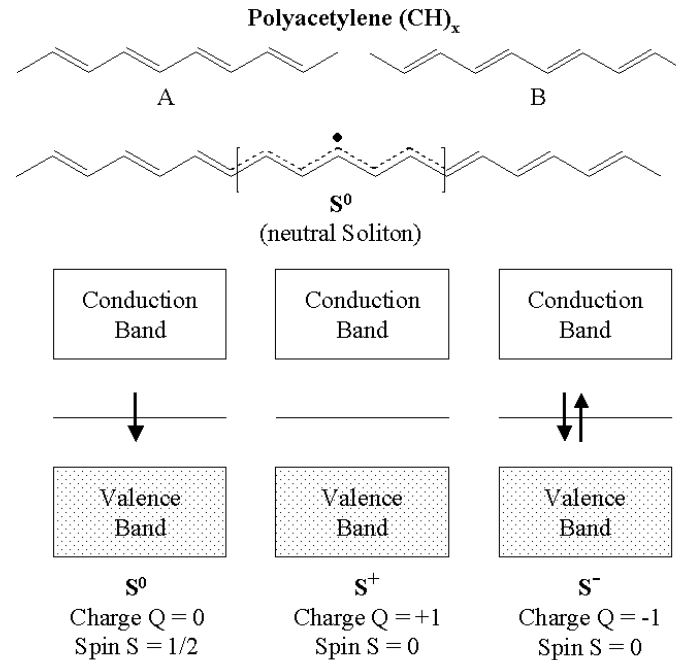
전도성 고분자의 전자적 구조

- π 전자의 농도와 고분자 구조의 연관성
- 전자-포논 상호작용이 크다(?)
- π 전자의 농도를 조절하여 반도체의 에너지 구조를 조절할 수 있다
- 일차원 구조-> 사슬과 평행한 방향으로 구조의 변형이 쉬워 폴라론 형성

전도성 고분자의 전자적 구조

- 도핑이나 빛으로 여기된 전하는 전자-포논 상호작용에 의해 비선형 여기자 형성
- 바닥상태에서 축퇴가 있는 폴리아세틸렌은 에너지띠 간격 중앙에 솔리톤 형성
- 나머지는 바이폴라론 형성

전도성 고분자의 전자적 구조



- 전하가 0인 경우 스핀이 1/2

SSH 이론

Intersoliton hopping

- 하전된 솔리톤과는 다르게 중성 솔리톤은 자유롭게 움직일 수 있다
- 하전된 솔리톤에 가까운 솔리톤은 상호작용하여 전자가 이동한다

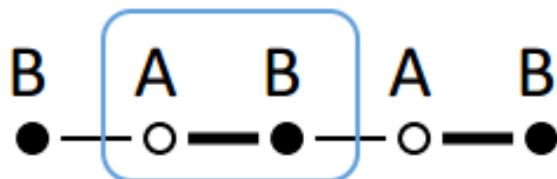
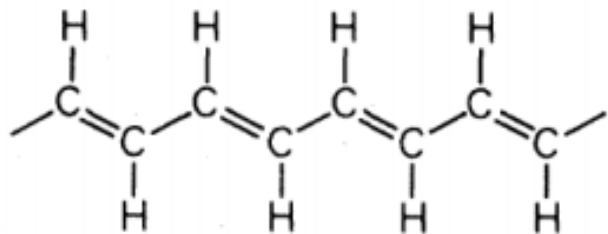
전도성 고분자의 전기적 특성

- 고분자에 도핑하는 경우 불순물이 고분자 사이에 들어가서 고분자와 전자를 교환
- 불순물이 산화제인 경우 고분자는 p형
- 알칼리 금속인 경우 n형

전도성 고분자의 전기적 특성

- 도핑한 폴리아세틸렌은 0.1%~6%의 도핑 농도에서는 전기적으로는 금속성을 가지지만 자기적으로는 자유전자가 없다.
- SSH 모델 -> 스핀이 없는 대전된 솔리톤이 사슬 내에 존재

Su-Schrieffer-Heeger Model



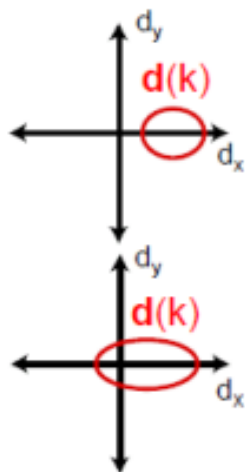
$$H = \sum_i (t + \delta t) c_{A_i}^\dagger c_{B_i} + (t - \delta t) c_{A_{i+1}}^\dagger c_{B_i} + h.c.$$

$$H(k) = \mathbf{d}(k) \cdot \vec{\sigma}$$

$$d_x(k) = (t + \delta t) + (t - \delta t) \cos ka$$

$$d_y(k) = (t - \delta t) \sin ka$$

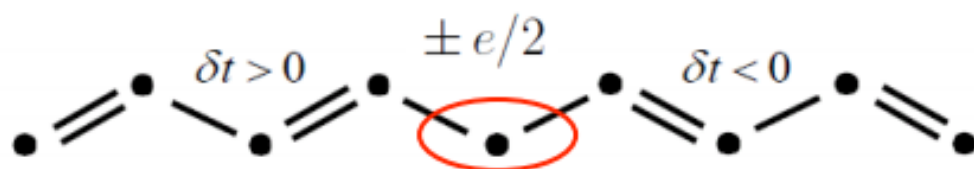
$$d_z(k) = 0$$



When $d_z(k)=0$, states with $dt>0$ and $dt<0$ are **topologically distinct**.

Domain wall states in SSH Model

An interface between topologically different states has protected midgap states



Field theory argument (Jackiw and Rebbi 76)

For small dt focus on low energy states with $k \sim \pi/a$

$$k \rightarrow \frac{\pi}{a} + q \quad \text{Take continuum limit} \quad q \rightarrow -i\partial_x$$

$$H = -i\mathbf{v}_F \sigma_x \partial_x + m(x)\sigma_y \quad \mathbf{v}_F = ta \quad m = 2\delta t$$

Massive Dirac fermions

$$E(q) = \pm \sqrt{(\mathbf{v}_F q)^2 + m^2}$$

Zero mode: topologically protected eigenstate at $E=0$



전도성 고분자의 전기적 특성

- 도핑이 증가하면 솔리톤이 energy band를 형성, 전기적 성질에 중요한 역할을 한다.
- *솔리톤이 어떠한 원리에 의해 Metal-insulator transition을 일으키는지는 불명*

전도성 고분자의 전기적 특성

- 바닥상태 축퇴가 되지 않은 고분자에서는 도핑에 의해 주입된 전하가 폴라론 등을 형성
- 폴라론은 전자 주위에 격자들의 뒤틀림이 수반된 준입자로서 전자와 같이 전하가 있으면 스핀이 있다.

응용 분야

