

有機半導体薄膜のインクジェット印刷形成のMD計算による検討 II

MD simulation study of inkjet printing of organic semiconductor thin-films II

産総研¹、東大² ○米谷 慎¹、峯廻洋美¹、山田寿一¹、長谷川達生^{1,2}

AIST¹, Univ. of Tokyo² ○Makoto Yoneya¹, Hiromi Minamawari¹, Toshikazu Yamada¹ and
Tatsuo Hasegawa^{1,2}

E-mail: makoto-yoneya@aist.go.jp

はじめに：溶液プロセスを用いた新規な有機半導体薄膜形成技術として、インクジェット印刷を用いた方法が提案されており¹⁾、有機半導体インクと貧溶媒間の液—液界面を有機半導体薄膜成長場とすることを一つの特徴としている。前回報告では、有機半導体分子として8BTBT8を用いた場合の液—液界面での薄膜形成メカニズムを分子動力学 (MD) 計算により検討し、8BTBT8の有する層状 (スメクチック) 液晶性が当該薄膜形成メカニズムにおいて重要な役割を果たしていることを示唆する結果を報告した。

本報告では、有機半導体分子として液晶性の無いTIPS ペンタセン (TIPS-PEN) を用いた場合についてMD計算を行った結果を報告する。

計算方法：TIPS-PENを用いたインクジェット印刷報文²⁾に従い、TIPS-PENとその良溶媒クロロベンゼン (CB) および貧溶媒DMFを前回と同様にモデル化し、上記インクジェット印刷プロセスにおける液—液界面の構造モデルを作成、これを初期構造としてMD計算を行った (図1)。計算結果：前回の8BTBT8を用いたMD計算では、1) 有機半導体インク8BTBT8/DCBと貧溶媒DMF間の液—液界面で、有機半導体インク層中のDCBのサブレイヤーDMF中への選択的な拡散、2) 集積した8BTBT8の気—液界面での自発配向単分子膜形成が見られた。図2に、この過程における8BTBT8分子の分子長軸の配向オーダーパラメータの変化を示す。

一方、今回のTIPS-PENを用いた場合には、上記8BTBT8の場合の1)、2) 共に見られず、溶媒CBはTIPS-PEN, DMF間で選択性無くほぼ一様に分布し、図2に示す様にTIPS-PENの配向はランダムのまま変化は見られなかった。

上記の8BTBT8とTIPS-PENの大きな違いは、両者のスメクチック液晶性の有無に依るものと考えられ、その重要性を支持する結果が得られた。

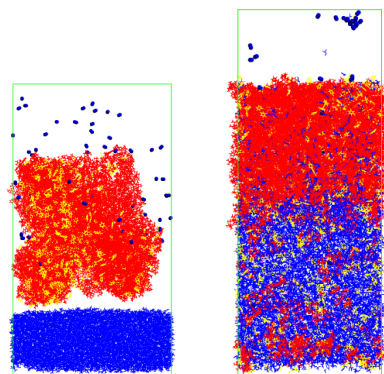


図1 初期構造 (左), 50ns後のスナップショット (右)

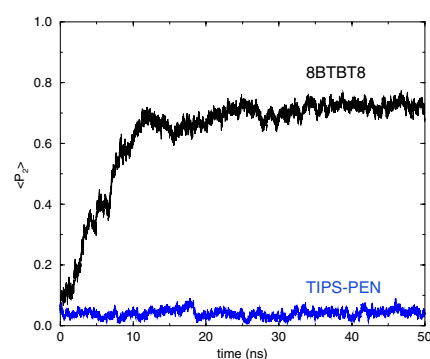


図2 配向オーダーパラメータ (0: ランダム配向、1:完全配向) の時間変化
8BTBT8(上), TIPS-PEN(下)

1) Minemawari et al., Nature, **475**, 364, 2011

2) Minemawari et al., JJAP, **53**, 05HC10, 2014