

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

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

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。しかしながら、本質的に分子レベルスケールである液—液界面の構造を、非平衡現象である薄膜成長過程の中でモニタすることが実験的に困難であることなどから、上記の液—液界面での薄膜成長メカニズムの詳細については理解がすすんでいない。

本報告では、この液—液界面での薄膜成長メカニズムを分子動力学 (MD) 計算により検討した結果を報告する。

計算方法：上記のインクジェット印刷技術で用いられている有機半導体分子 8-BTBT-8、その良溶媒 DCB および貧溶媒 DMF を、general AMBER 力場を用いてモデル化し、電荷分布は B3LYP/6-31G(d) レベルの分子軌道計算による RESP 電荷を用いた。まず最初に、8-BTBT-8/DCB 混合溶液層の窒素雰囲気中の MD 計算を行い有機半導体インク層を、モデル基板上での DMF 溶液膜の MD 計算を行い貧溶媒膜を、それぞれモデル化した。次に、後者の貧溶媒膜上に前者の有機半導体インク層を重ね、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 (図 1) を作成し、これを初期構造として MD 計算を行った。

計算結果：上記 MD 計算において、有機半導体インクと貧溶媒間の液—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が見られた。同時に、有機半導体インクと気相の界面においても DCB の気相中への拡散が見られ、結果として半導体インク層中の 8-BTBT-8 純度が向上・集積していく過程がシミュレーションにより得られた。図 2 に示す、MD 計算 2 ns 後のスナップショットでは、初期には DMF 100% であったサブレイヤーが DMF/DCB 混合溶液となり、また DCB が気相界面に集積しているのが見て取れる。

上記過程における 8-BTBT-8 分子凝集構造の変化については当日報告する。

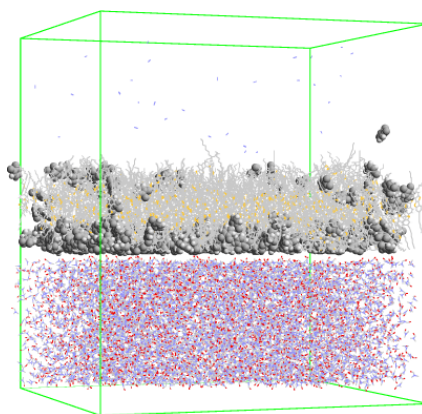


図 1 初期構造

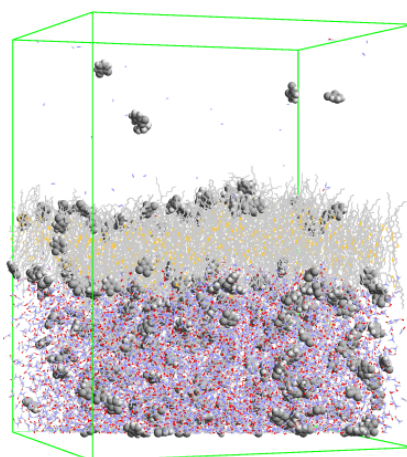


図 2 MD 計算 2 ns 後のスナップ
ショット

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