屈曲型分子群が切り拓く有機半導体材料の新展開

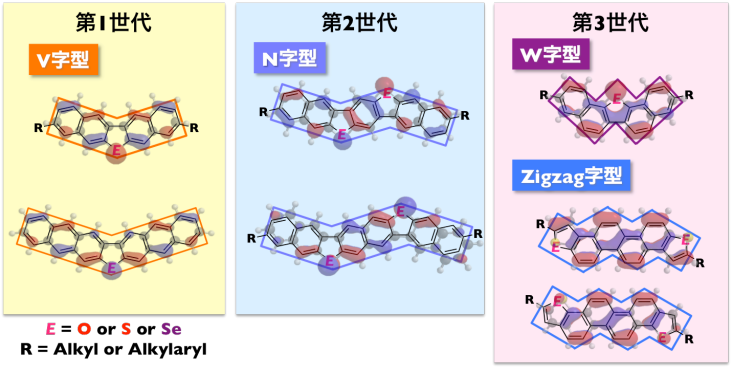
New Develpments of Organic Semiconductoring Materials Driven by Bent-shaped Molecules

東大院新領域 [1], JST さきがけ [2] ○岡本 敏宏 [1,2]

Graduate School of Frontier Sciences, Univ. of Tokyo[1], PRESTO, JST.[2] °Toshihiro Okamoto[1,2]

E-mail: tokamoto@k.u-tokyo.ac.jp

有機化合物からなる半導体である有機半導体材料は、実用的に用いられているシリコンなどの無機半導体材料と比較して、機械的に柔軟であり、簡便な印刷プロセスで低コスト生産をすることができる特長がある。この有機半導体の柔軟性や印刷プロセス性は、分子同士が弱い分子間力で結びついているからである。しかしながら、この弱い分子間力のため、室温で分子は熱振動することによってキャリアの伝導が阻害され、キャリア移動度（以下、移動度と略す）が低く、また、デバイスの熱安定性の観点からも課題がある。



図．開発した屈曲型分子群の分子構造と最高占有軌道図.

我々は、10 cm^2 /Vs 級の実用的高移動度有機半導体の開発戦略として、「分子振動」の抑制を目的として、有機半導体の分子設計に「屈曲」という新概念を導入した屈曲型分子群 [1-7]（図）に着目した。ペンタセンに代表されるいわゆる棒状パイ電子系コアは、長軸回りの回転運動をはじめ熱振動が起こりやすい。それに対して、屈曲型分子は、屈曲部位の大きな軌道係数を有した嵩高い典型元素（*E*）間の軌道の重なりと、屈曲形状による分子振動の抑制などによって、高移動度化と分子集合体における構造安定化などが期待できるパイ共役分子群である。実際、塗布法によって単結晶トランジスタを作製したところ、得られた化合物の大部分において 10 cm^2 /Vs 級の高移動度を実現し、印刷できる論理回路への応用の道が拓かれた。また、期待通り高温下での構造安定性にも優れており、屈曲型分子群は実デバイス製作の際のプロセス許容度と製品の熱耐久性が飛躍的に向上した実用に耐えうる新奇な有機半導体材料群であることを明らかとした。一連の効果は、屈曲構造のために導入したヘテロ環が炭化水素のみからなる芳香族環に比べて柔軟であり，分子がより密に自己組織化できることに起因していることが単結晶構造解析などの集合体構造解析により明らかになった。本発表では、化学およびデバイス工学的な観点からの屈曲型分子群が切り拓く新展開についてわかりやすく紹介したい。

参考文献: 1) *Adv. Mater.* **2013**, *25*, 6392. 2) *Adv. Mater.* **2014**, *26*, 4546. 3) *Chem. Commun.* **2014**, *50*, 5342. 4) *RSC Adv.* **2016**, *6*, 28966. 5) *Poly. J.* **2017**, *49*, 215. 6) *Chem. Lett.* Accepted.

© 2017年 応用物理学会