

光前駆体法で成膜したアントラチオフェン誘導体の 置換基構造—薄膜物性相関

Substituent Effects on the Thin-Film Properties of Anthrathiophene Derivatives Solution-Processed via a Photoprecursor Approach

奈良先端大物質 〇(M2) 清水 勇佑, 前田 明宏, 鈴木 充朗, 山田 容子

NAIST, 〇Yusuke Shimizu, Akihiro Maeda, Mitsuharu Suzuki, Hiroko Yamada

E-mail: hyamada@ms.naist.jp

【緒言】 有機半導体の特性は、孤立分子の性質だけでなく分子の配列や配向にも強く依存する。分子の集合挙動は、同じ中心骨格を持つ化合物であっても置換基構造や成膜条件によって大きく異なることから、それらの因子を詳細に検討することは有機半導体の開発において極めて重要である。これに関連して我々は、光前駆体法と呼ぶ独自の成膜法を用いた薄膜構造制御を駆使し、有機太陽電池の高性能化に取り組んでいる^[1]。光前駆体法とは、可溶性の α -ジケトン (DK) 型前駆体を塗布した後、その場で光反応を行って目的とするアセン誘導体の薄膜を得る手法である。本研究では、先に有機太陽電池の p 型材料として優れた特性を示すことを報告した AtDEH^[2] をベンチマーク化合物とし、関連する化合物の置換基構造—薄膜物性相関を調査した。

【結果と考察】 AtDEH から置換基 R^1 と R^2 を変更した化合物 2 種の DK 型光前駆体を新たに合成し、それぞれ光前駆体法により成膜した (Figure 1)。原子間力顕微鏡による薄膜表面の観察ではいずれも AtDEH とほぼ同等の平滑性を示し、アントラチオフェン (At) ユニットに比較的大きな置換基を導入したにも関わらず、バルクスケールでの分子凝集挙動には殆ど違いが見られなかった。これは DK 型前駆体が、その非平面構造のために置換基の有無に関わらず低凝集性であることを反映した結果と推測される。一方、大気下光電子分光法で測定したイオン化エネルギー (IE) と、空間電荷制限電流法により測定した正孔移動度 (μ_h) には、化合物間で優位の差が認められた (Table 1)。この差は、置換基の直接的な電子効果に加え、置換基が誘起する分子配列の変化による影響にも起因することが推察される。例えば PEAtDHex と PEAtDEB を比較すると、アルキル基の分岐の有無のみで IE が 0.18 eV も変化しており、これは置換基の電子効果では説明できない。発表では、薄膜物性の詳細に加えて、太陽電池性能の評価結果についても議論する。

[1] Yamaguchi, Y. et al. *Sci. Rep.* **4**, 7151 (2014).
[2] 高平他, 第 63 回応用物理学会春季学術講演会 20p-W531-11 (2016).

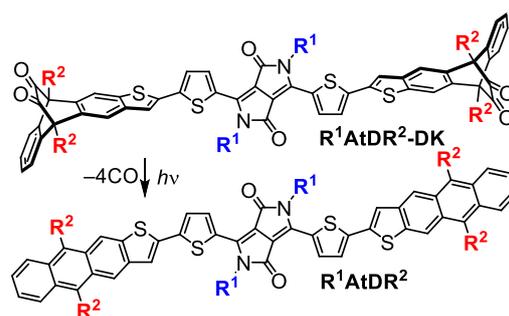


Figure 1. Chemical structures of the AtD derivatives studied in this work and the corresponding DK-type photoprecursors.

Table 1. Substituent structures and the corresponding IE and μ_h .

R^1AtDR^2	R^1	R^2	IE (eV)	μ_h ($\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$)
AtDEH ^[2]		H	-5.42	0.77×10^{-4}
PEAtDHex			-4.99	3.1×10^{-4}
PEAtDEB			-5.17	1.3×10^{-4}