pMAIRS-CLS 法を用いたペンタセン前駆体薄膜の熱転化反応の定量的解析

Quantitative Analysis of Thermal Conversion of Pentacene Precursor in a Thin Film Using pMAIRS-CLS

京大化研 [1] ◦藤原 龍以 [1]，塩谷 暢貴 [1]，冨田 和孝 [1]，下赤 卓史 [1]，長谷川 健 [1]

ICR, Kyoto Univ. [1] ◦Ryoi Fujiwara[1], Nobutaka Shioya[1], Kazutaka Tomita[1], Takafumi Shimoaka[1] Takeshi Hasegawa[1]

E-mail: fujiwara.ryoi.38n@st.kyoto-u.ac.jp

ペンタセン（PEN）は有機溶媒に溶けにくいことから，低コストで製膜できる湿式法を直接用いることが困難である．このような有機半導体材料では，可溶性の前駆体化合物の薄膜を湿式法により作製した後，熱もしくは光によって転化させて，目的とする化合物の薄膜を得る前駆体法が有用である．PEN の代表的な可溶性前駆体化合物として，熱処理により PEN に転化する 13,6-*N*-Sulfinylacetamidopentacene（SAP; Fig. 1）がある[1]．これまでの多くの研究では X 線や電子線回折を用いて，転化後の“十分に結晶成長した”PEN 分子の結晶構造についてのみ議論が行われてきた[2]．すなわち，これまで SAP から PEN への熱転化反応における構造変化の過程について，定量的な議論は行われていない．

そこで本研究では，赤外 p 偏光多角入射分解分光（赤外 pMAIRS）法 [3]を用いて，SAP から PEN への熱転化の過程を定量的に詳しく調べた．その結果，熱転化反応は SAP および 2 種類の異なる結晶多形からなる PEN の 3 成分系であることがわかった．さらに，得られた pMAIRS スペクトルを無配向スペクトルに変換後，classical-least squares (CLS)回帰法[4]を適用することで，熱転化反応における化学成分の変化過程を定量的に議論できた．それぞれの成分の量的変化を調べた結果，転化によって PEN の結晶多形である Thin-Film 相と Bulk 相が同時に生成するが，最終的には Thin-Film 相はすべて Bulk 相へと構造転移していくことがはじめてわかった．

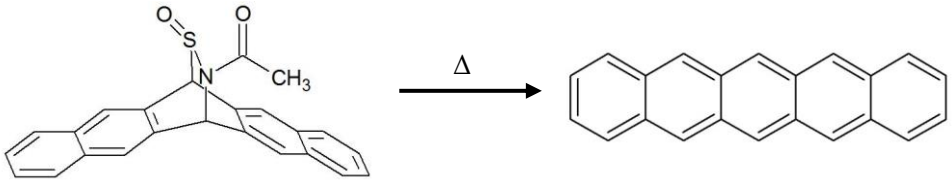

Fig. 1 The conversion reaction from SAP to PEN

References

[1] A. Afzali, et al., *J. Am. Chem. Soc*. **2002**, *124*, 8812.

[2] Y. Murai, et al., *Appl. Phys. Express.*, **2011**, *4*, 121603.

[3] T. Hasegawa, *Anal. Chem*. **2007**, *79*, 4385.

[4] T. Hasegawa, *Quantitative Infrared Spectroscopy for Understanding of a Condensed Matter*. **2017**, Springer, Tokyo.