

効率的な電荷キャリア輸送に向けた テトラベンゾポルフィリンの分子エンジニアリング

Molecular Engineering of Tetrabenzoporphyrin toward Efficient Charge-Carrier Transport

奈良先端大物質¹, 阪大院工² ◯(M1)伊藤 達哉¹, Jeong Eunjeong¹, 鈴木 充朗², 山田 容子¹

NAIST¹, Osaka Univ², °Tatsuya Ito¹, Eunjeong Jeong¹, Mitsuharu Suzuki², Hiroko Yamada¹

E-mail: hyamada@ms.naist.jp

【緒言】 溶液プロセスで成膜可能な高性能有機半導体の開発は、低コストかつ大面積の有機電子デバイスを実現するための鍵である。特に、薄膜中における分子の配向・配列を制御するための分子設計および成膜手法に関する方法論の確立は、有機デバイスの高性能化に欠かせない。この観点から我々は、有望な p 型有機半導体の一つであるテトラベンゾポルフィリン (BP) に着目し、有機デバイスへの応用を志向した分子エンジニアリングを行ってきた^[1,2]。BP は剛直で大きな π 共役骨格をもち、この構造特性は薄膜中で効率的な電荷キャリア経路を形成するのに適していると考えられる。実際に、(triisopropylsilyl)ethynyl 基を二つ導入した可溶性誘導体 TIPS-BP (Fig. 1) は、ディップコート法を用いて作製した薄膜中で $1.1 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ と良好な電界効果ホール移動度を示した^[2]。本研究ではさらに高い移動度を得ることを目指し、分子構造の最適化を検討した。

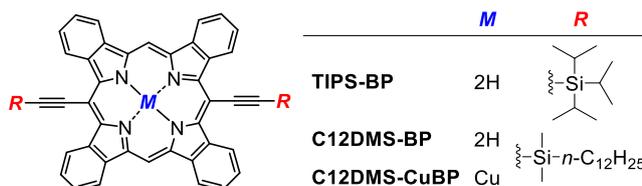


Fig. 1 Chemical structures of the BP derivatives.

【結果と考察】 塗布プロセスで取り扱うために十分な溶解性の確保と、長鎖アルキル間の相互作用によるタイトな分子パッキングの形成との両立を狙い、(*n*-dodecyldimethylsilyl)ethynyl 基を二つもつ C12DMS-BP を設計・合成した (Fig. 1)。この新規誘導体は、ディップコート法で作製した薄膜中で最大 $2.0 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ と、TIPS-BP に比べて約 2 倍高い電界効果ホール移動度を示した。また、BP 骨格の中心に金属イオンを導入した錯体も評価したところ、二価の銅錯体 C12DMS-CuBP (Fig. 1) で $2.7 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ の移動度が得られた。

X 線回折測定の結果、C12DMS-BP と C12DMS-CuBP はいずれも薄膜中で herringbone 型のパッキングを形成することが分かった。一方、TIPS-BP は brickwork 型のパッキングを形成することから、このパッキング様式の違いが移動度の違いにつながったものと推察される。例えば、herringbone 型のパッキングは、brickwork 型に比べてドメイン境界による電荷移動度の低下が小さいとされており^[3]、それが今回の移動度向上の一因となった可能性が考えられる。発表では、アルキル基の長さや中心金属イオンの異なる誘導体の結果と合わせ、BP 誘導体における分子構造、分子パッキング、および半導体特性の相関を議論する。

[1] K. Takahashi et al. *J. Porphyrins Phthalocyanines* **2015**, *19*, 465–478. [2] K. Takahashi. et al. *ACS Appl. Mater.* **2017**, *9*, 8211–8218. [3] Rivnay, J. et al. *Nat. Mater.* **2009**, *8*, 952–958.