

コンビナトリアル実験とベイズ最適化による 有機トランジスタの印刷条件の高速最適化

Rapid Optimization of Printing Conditions for Organic Transistors

by Combinatorial Experiments and Bayesian Optimization

山形大 ROEL, °(B4)小林 亮太, 池田 侑司, 逸見 悠大, 松井 弘之

ROEL, Yamagata Univ., °Ryota Kobayashi, Yuji Ikeda, Yudai Henmi, Hiroyuki Matsui

E-mail: tkh43720@st.yamagata-u.ac.jp, h-matsui@yz.yamagata-u.ac.jp

【はじめに】有機トランジスタの印刷作製プロセスにおいて移動度に影響すると考えられる条件は多く、最適化には多くの時間を要する。そこで、本研究では網羅的に条件探索を行うコンビナトリアル実験と、近年注目されている最適化手法であるベイズ最適化を組み合わせることで短期間（15日間）での条件最適化を行ったので報告する。

【実験①】 ベイズ最適化による溶媒選択、アニール温度、ポリマーブレンド比率最適化

ディスペンサ印刷で作製する Ph-BTBT-C10 トランジスタの条件最適化を行った。探索範囲は溶媒 4 種類、アニール温度 6 種類、PMMA ブレンド比率 13 種類の計 312 条件である。ベイズ最適化には「PHYSBO」を使用した。1 バッチあたり 4 条件を同時に行い、1 条件あたり 18 個の素子を作成し、移動度の平均を算出した。最適化結果を Fig. 1 に示す。

5 バッチ目で最高移動度 $0.22 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ を記録し（探索範囲の 7.7%）、その後は 8 バッチ目まで改善が見られなかったため、最適化プロセスを終了した。この時の最適条件は溶媒がアニソール、アニール温度が 120°C 、PMMA ブレンド比率が 1% であった。PMMA ブレンド比率は 1%~20% に至るまでさほど変化が見られなかった。

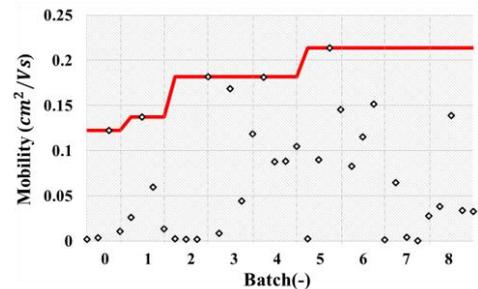


Fig.1 Mobilities during optimization

【実験②】 コンビナトリアル法による製膜温度、有機半導体溶液の塗布量最適化

実験①の結果を基に塗布体積が制御可能なディスペンサを使用し、製膜温度と塗布量を変えながら有機半導体層の製膜を行った。結果を Fig2 に示す。その結果移動度が $1.2 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ を超える条件を発見した。(Fig. 3)

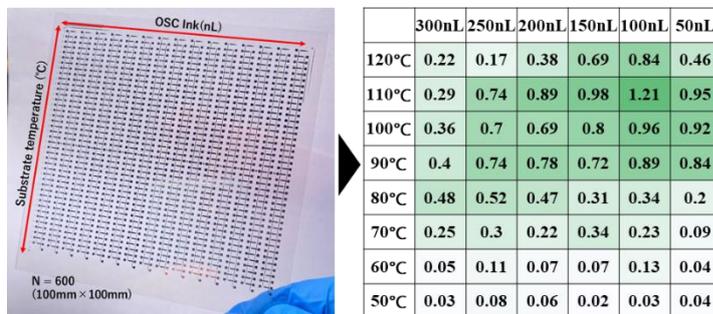


Fig. 2 Combinatorial experiment

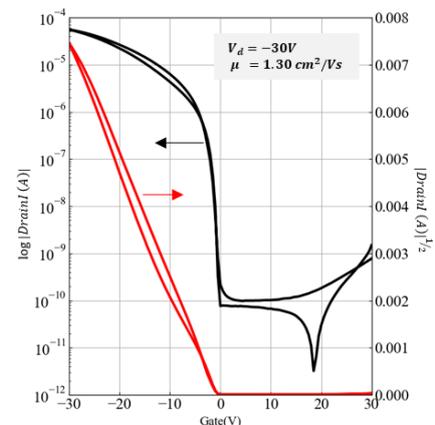


Fig. 3 Best transfer characteristics

【謝辞】本研究の一部は JST, CREST, JPMJCR18J2 の支援を受けて行われました。