

有機半導体分子 BTBT の緻密な分子配列制御による キャリア輸送能の変調

Modulation of Charge Carrier Transport Properties

based on Precise and Systematic Arrangement Control of Organic Semiconductor BTBT

阪大院工 °赤井 亮太, 岡 弘樹, 藤内 謙光

Grad. Sch. Eng., Osaka Univ., °Ryota Akai, Kouki Oka, Norimitsu Tohnai

E-mail: r_akai@chem.eng.osaka-u.ac.jp

【背景】 有機半導体は、地球上に豊富な元素 (C, H, N, O, S) で構成され、有機溶媒に可溶であるため塗布法を利用できる。その中でも、低分子有機半導体は、 π 共役の広がりに応じた高いキャリア移動度を示しており¹、隣接分子間の π 共役の重なりがキャリア移動度に大きく作用する。特に、edge-to-face herringbone-type arrangement がキャリア移動に有利であることが知られているが²、その隣接分子間の中心間距離や二面角の緻密な最適化は従来困難であった。

【結果】 本研究では、機能性分子の構造を全く変えることなく、緻密かつ系統的に分子配列のみを制御することで、隣接分子間の π 共役の重なり方の微細な違いがキャリア移動度を与える影響を解明した。代表的な有機半導体である [1]benzothieno[3,2-*b*][1]benzothiophene (BTBT) を機能性部位に持つジスルホン酸を合成し、4 種類の butylamine の構造異性体との有機塩をそれぞれ作製した。すべての有機塩で、butylamine の種類によらず BTBT の電子状態は同一で、図 1 に示すように、分子配列は電荷移動に有利な edge-to-face herringbone-type arrangement であったが、butylamine の α 炭素の置換基数に基づく立体障害に応じて BTBT の分子配列が微細に異なっていた。Flash-photolysis time-resolved microwave conductivity (FP-TRMC) 測定から、edge-to-face herringbone-type arrangement を有する 4 種類の有機塩間での過渡伝導度は、2 倍と大きく異なり、*P*、*T*₁、*T*₂ 方向の距離が 6.2 Å、6.1 Å、6.1 Å で、二面角が 45.9° の (*rac*)-*sec*-butylamine を用いた有機塩では最も高い $1.62 \times 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ だった。同手法は、キャリア移動に有利な edge-to-face herringbone-type arrangement の中でも、微細な分子配列の違いからキャリア移動度が大きく異なることを初めて明らかにした。

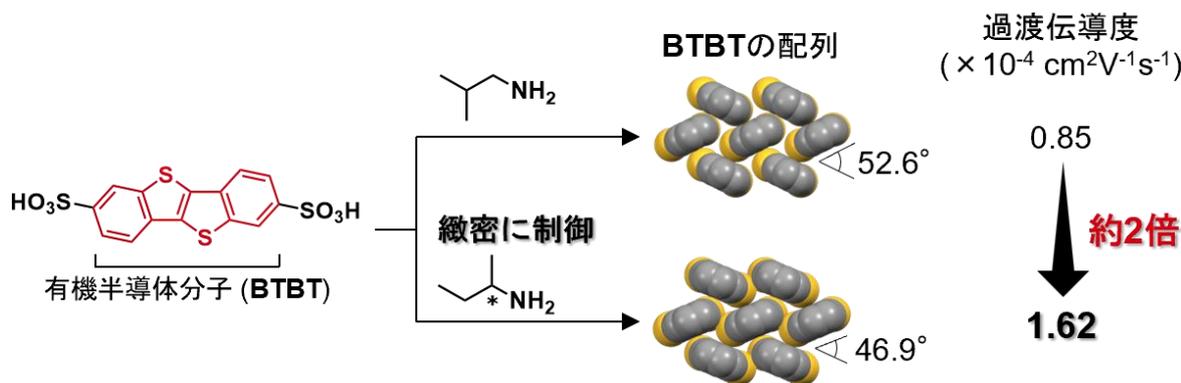


図 1. 4 種類の有機塩の構築とそれぞれの分子配列と過渡伝導度の相関

【参考文献】

- 1) K. Takimiya *et al.*, *Adv. Mater.* **2011**, *23*, 4347–4370.
- 2) S. Seki *et al.*, *Adv. Mater.* **2016**, *28*, 7106–7114.