

課題名 (タイトル) :

## 新規有機半導体材料の開発

利用者氏名 : ○中野 正浩、品村 祥司

所属 : 創発物性科学研究センター 創発分子機能研究グループ

## 1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

近年、有機エレクトロニクス分野において“高い電子受容性”を持つ有機分子骨格が、有機デバイスの性能向上・応用拡大の観点から重要視されている。しかし、その合成や設計が容易ではないために、電子受容性分子骨格 (n 型骨格) は正孔受容性分子骨格 (p 型骨格) と比べると開発が大きく遅れており、有機デバイス材料としての知見も少ないというのが現状である。

このような中、申請者は新規な n 型骨格としてナフトジチオフェンジイミド (NDTI, JACS, 2013, 135, 11445.) を開発した。NDTI は大気中の電子トラップの影響を受けない高い電子受容性 ( $E_{\text{LUMO}}$ : -4.0 eV) を持ちながらも容易に分子修飾が可能であるため、NDTI を用いて様々な高電子受容性半導体材料の開発が期待できる。

本研究の目的は NDTI を用いて、様々な電子受容性の高い半導体材料を開発することであるが、材料の合成に先立ち、量子科学計算を行うことによって物性を予測した。また、実際に得られた半導体特性について、計算を手掛かりとした電子構造の考察を行った。なお、本課題は 2014 年度に採択された科学研究費助成事業 (課題名: ナフトジチオフェンジイミドを基盤とする有機半導体分子の開発、課題番号: 26810109、代表者: 中野正浩) と連携するものである。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

Gaussian 09 プログラムパッケージを用い、密度汎関数法により有機半導体分子 (NDTI 誘導体) のフロンティア軌道レベル、分子軌道、最安定構造に関する計算を行った。

また、ADF プログラムを用い、半導体分子間の transfer integral についての計算も行った。

## 3. 結果

(1) NDTI と種々の  $\pi$  共役化合物とを共重合させた高分子半導体材料の合成を行った。得られた高分子材料は、前もって行った量子科学計算結果とよく一致したフロンティア軌道エネルギーレベルを持ち、その値に応じた有機トランジスタ特性を示した (n 型、または両極性挙動)。また、計算により得られた分子軌道を用いて、NDTI ポリマーにおける共重合ユニットが及ぼす電子的な影響についての考察を行った。 (*Macromolecules*, 2015, ASAP.)

(2) NDTI と様々な正孔受容性骨格を組み合わせた低分子両極性トランジスタ材料を開発した。材料の開発に当たって、量子科学計算結果を基にした分子設計を行うことで、正孔輸送と電子輸送のバランスがきわめて良好な材料を開発することができた。(論文投稿準備中)

## 4. まとめ

本研究では NDTI を用いた様々な高電子受容性の半導体材料の開発を行ったが、量子科学計算に基づく計算結果 (フロンティア軌道レベル、再配向エネルギーなど) は物性の予測・分子設計を行うにあたって非常に有用であった。

## 5. 今後の計画・展望

今回得られた分子設計に関する知見を用いて、より有用な NDTI ベースの高電子受容性の半導体材料の開発を行う。

## 平成 26 年度 RICC 利用報告書

### 平成 26 年度 RICC 利用研究成果リスト

#### 【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

M. Nakano, I. Osaka, K. Takimiya, *Macromolecules*, 2015, ASAP (DOI: 10.1021/ma502306f)