

# 解説

J. Jpn. Soc. Colour Mater., 90 [7], 233-237 (2017)

## チオフェン縮環型ナフタレンの有機薄膜トランジスタ特性に対するアルキル置換基の効果：分子シミュレーション，合成，およびデバイス評価

久米田元紀\*・山本惇司\*・麻田俊雄\*\*,\*・松井康哲\*,\*・高木謙一郎\*・  
末永 悠\*・長柄邦彦\*・太田英輔\*,\*・大垣拓也\*,\*・内藤裕義\*,\*・  
小関史朗\*\*,\*・池田 浩\*,\*,\*†

\*大阪府立大学大学院工学研究科 大阪府堺市中区学園町1-1 (〒599-8531)

\*\*大阪府立大学大学院理学系研究科 大阪府堺市中区学園町1-1 (〒599-8531)

\*\*\*大阪府立大学21世紀科学研究センター分子エレクトロニックデバイス研究所 大阪府堺市中区学園町1-1 (〒599-8531)

† Corresponding Author, E-mail: ikeda@chem.osakafu-u.ac.jp

(2017年5月29日受付, 2017年6月27日受理)

### 要 旨

有機半導体の理想的な開発プロセスは、理論と分子シミュレーションによる性能予測、効率的な有機合成、そしてデバイス作製と評価というサイクルからなる。本研究では、われわれは有機半導体の候補としてアルキル置換テトラチエノナフタレン誘導体に注目し、まず量子力学/分子力学法に基づく独自の分子シミュレーションで誘導体のアモルファス固体の正孔移動度を予測した。次にその誘導体を合成し、さらにその有機電界効果トランジスタの正孔移動度を測定した。結果として、正孔移動度の予測値と実測値がよく対応し、この分子シミュレーションに端を発する開発サイクルは有機半導体の効率的な開発手段となることを示した。

キーワード：アモルファス固体分子シミュレーション，キャリア移動度，フロー合成法，OFET

### 1. はじめに

従来の有機半導体 (OSC) の開発の多くは、材料合成から始まり、次にデバイス評価を行い、最後に計算による理論的補足を行う例が多かった。しかし、この手法ではすべての材料をデバイス化する必要があるなど、非効率的である点は否めない。そこでわれわれは最近、計算によりOSC材料の基本性能をまず予測し、次に材料合成とデバイス評価を行う、より効率的な開発サイクルを提唱した<sup>1)</sup> (図-1)。この研究ではp型有機半導体に注目し、まずその正孔移動度を量子力学/分子力学法 (QM/MM法, 2013年Nobel化学賞の対象) に基づく独自の分子シミュレーションによって予測した。次に材料合成と実デバイスの正孔移動度測定を行った結果、正孔移動度の予測値と実測値がよく対応し、本手法がOSCの効率的な開発に有効であることがわかった。本稿ではその研究を概説する。

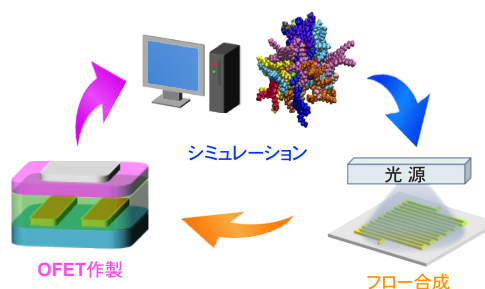


図-1 分子シミュレーションから始まる理想的OSC開発サイクル

### 2. 背景

無機半導体に比べ、OSCは低コストで柔軟性に富み、有機発光ダイオード、有機太陽電池、有機電界効果トランジスタ (OFET) など、さまざまな電子デバイスに応用されている。OSCのキャリア移動は、分子間相互作用 (例： $\pi$ - $\pi$ 、CH- $\pi$ およびS-S相互作用) によって形成されたパッキング構造によって制御される。たとえば、DNNT<sup>2)</sup> やDPh-BTBT<sup>3)</sup> (図-2) のような一次元縮環型 $\pi$ 電子共役系は、分子間 $\pi$ - $\pi$ 相互作用によって密なパッキング構造を形成するために高い正孔移動度を示す。また、最近では、さらに広範な分子間 $\pi$ - $\pi$ 相互作用によってより密なパッキング構造を期待できる、二次元縮環型 $\pi$ 電子共役系が注目されている<sup>4)</sup>。

実際に、われわれも二次元縮環型 $\pi$ 電子共役系であるテトラチエノナフタレン3TTNを合成した。単結晶におけるX線結晶構造解析と量子化学計算の結果、密なパッキング構造により

【図表について】本誌では白黒で掲載された図版も、論文公開サイト「J-STAGE」ではカラーでご覧いただけます。ぜひともご利用ください。  
www.jstage.jst.go.jp/browse/shikizai/-char/ja/



【氏名】くめだ もとき  
【現職】大阪府立大学大学院工学研究科物質・化学系  
専攻博士前期課程2年  
【趣味】カラオケ  
【経歴】平成28年大阪府立大学工学域物質化学系学類  
応用化学課程卒業。