

水素結合性有機半導体の物性解明

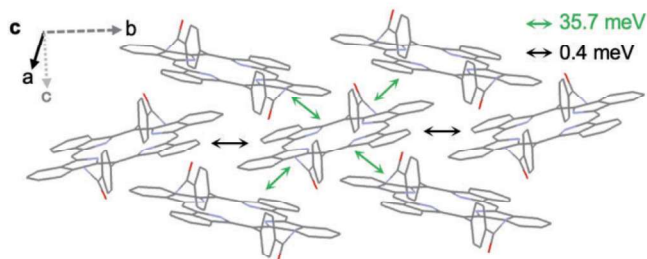
Elucidation of the physical properties of hydrogen-bonded organic semiconductors

京都大学化学研究所 物質創製化学研究系 有機元素化学研究領域 山内 光陽

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、 π 拡張ポルフィリン誘導体の構造最適化、および結晶構造における分子間相互作用について理論的な評価を行った。

有機半導体は、 π 共役系有機化合物が π - π 相互作用などのファンデルワールス相互作用によって形成された分子集合体で構成されている。そのため、分子の集合構造を微調整することで、電界効果トランジスタ (FET) における電荷移動度の向上が可能である。特に可溶性の有機半導体は、溶液塗布プロセスにより低コストで薄膜化ができるため、次世代フレキシブルデバイスへの応用が期待されている。より優れた電荷移動度を実現するためには、分子間相互作用および分子配向を制御し、電荷輸送に適した集合構造を作り出すことが重要である。超分子化学で頻繁に用いられている水素結合は、ファンデルワールス力よりも指向性があり、集合構造の制御に適している。しかし、水素結合性の有機半導体薄膜の例は限定されており、その作製法、集合構造、およびデバイス性能は未解明な点が多い。本研究では、p 型有機半導体として有望なテトラベンゾポルフィリン (TBP) 骨格に水素結合を示すアミド基を導入した **TBP 誘導体 (TBP_A)** を用い、水素結合によって誘起された集合構造の解明、およびその FET における電荷移動度の評価を行った。難溶性の **TBP_A** の薄膜を作製する戦略として、その可溶性熱前駆体を合成し、溶液塗布プロセスにより前駆体薄膜を作製した後に加熱により **TBP_A** 薄膜を得る“熱前駆体法”を用いた。X 線結晶構造解析によって得られた **TBP_A** のパッキング構造を基に、分子間での電子カップリングの大きさを示す電荷移動積分の値を ADF プログラムにより算出した (右図)。その結果、2次元方向への効果的な電子カップリングが明らかになり、実際に作製した薄膜 FET デバイスでの高いホール移動度を支持した。現在、本システムの利用成果を含む論文を投稿中である。



発表論文(謝辞あり)

K. Miyazaki, K. Yamamoto, M. Yamauchi, Y. Mizuhata, H. Matsuda, N. Shioya, T. Hasegawa, N. Aratani, H. Yamada, *J. Porphyr. Phthalocyanines*, **2025**, in press (DOI: 10.1142/S1088424625500166).