

界面の振動分光学

Vibrational Spectroscopic Study of Surface Chemistry

京都大学 化学研究所 分子環境解析化学研究領域

長谷川 健

研究成果概要

高性能有機半導体材料である Ph-BTBT- C_n (Fig. 1) [1]は、薄膜中で“バルク相” [2]および“薄膜相” [3]と呼ばれる 2 種類の異なる結晶構造をとる。この中でも、バルク相の薄膜が特に優れた電荷輸送特性を示す[1].

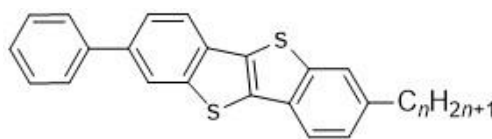


Figure 1. Chemical structure of Ph-BTBT- C_n .

したがって、これらの結晶多形の制御機構を

解明することがデバイス応用の観点から重要である。本研究では、スピンコート法により製膜した薄膜を室温で放置したときの、結晶構造の変化を X 線回折法によって調べた。また、固体測定としては高分解な 1 cm^{-1} での赤外分光法を用いた構造解析により、エイジングによる結晶構造の変化を、フェニル基やアルキル側鎖などの官能機単位でより詳細に調べた。

Ph-BTBT- C_n スピンコート膜を数日間大気中に放置すると、薄膜相からバルク相へと結晶構造が変化することを X 線回折により明確に観測した。さらに、量子化学計算と実測で得た赤外スペクトルを比較することによって、バルク相に特有なヘリングボーンパッキング構造を特徴付けるためのマーカーバンドを発見した。このバンドに基づいた解析を行うことで、わずか 1 日以内に、Ph-BTBT- C_n のパッキング構造が変化し始めることを観測した。また、アルキル鎖の振動バンドも解析することによって、アルキル側鎖間の相互作用が結晶構造の変化に寄与していることも解明した。

参考文献

- 1) Iino, H.; et al, *Nat. Commun.* **2015**, 6, 6828.
- 2) Minemawari, H.; et al, *Appl. Phys. Express* **2014**, 7, 091601.
- 3) Hofer, S.; et al, *J. Phys. Chem. C.* **2021**, 125, 28039-28047.

発表論文(謝辞なし)

Oka, T.; Shioya, N.; Shimoaka, T.; Hasegawa, T. Structural Rearrangement of Organic Semiconductor Molecules with an Asymmetric Shape in Thin Films. *J. Phys. Chem. C* **2023**, 127 (15), 7560–7564. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.3c01003>.