

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・Wang Chengyuan・大垣拓也・Rukeyamu Maitisidike・鈴木直弥・川畑公輔・阿相昴斗・田中俊一・瀧宮和男

理研における所属研究室名 :

創発物性科学研究センター 創発分子機能研究チーム

<p>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</p> <p>近年、軽量・柔軟・印刷が可能であるなどの特徴を持つ有機半導体デバイスが注目されている。有機半導体デバイスの性能を向上させるためには、適切に設計された半導体分子を開発し、デバイスへ応用することが重要であると考えられる。優れた有機半導体材料を効率的に探索するためには、計算化学を用いて、候補分子の物性をあらかじめ予測しておくことが有効である。また、実際に材料を合成し、デバイスに応用して得られた結果を説明する上でも、計算化学は重要である。本課題では新規有機半導体材料の開発を目的とし、様々な有機半導体材料の理論計算を行った。</p> <p>2. 具体的な利用内容、計算方法</p> <p>Gaussian 09 および Gaussian 16 プログラムパッケージを用い、有機半導体分子の最安定構造、フロンティア軌道 (HOMO および LUMO) のエネルギー準位と軌道分布、電子遷移、再配向エネルギーを計算した。また、計算結果の確認と可視化には、GaussView 6 を利用した。さらに、分子間での軌道の重なり (移動積分) は ADF プログラムを用いて評価した。</p> <p>3. 結果</p> <p>(1) 電子受容性のペリレノチオフェンジイミド骨格をもつ種々の誘導体を新たに合成し、各種物性を測定した。合成した材料は近赤外領域での吸収および発光を示し、これらは計算で予測されていた値と対応していた。さらに合成した材料を、有機薄膜トランジスタと有機薄膜太陽電池に応用</p>	<p>し、優れた特性を示すことが明らかになった。</p> <p>(2) メチルチオ基を持つ種々の p 型有機半導体材料を合成した。これらの材料の結晶構造は、メチルチオ基のない母体骨格とは大きく異なっており、ADF プログラムによる分子間のホール移動積分の計算結果から、二次元的な電子構造であることが示唆された。実際に合成した材料の有機単結晶トランジスタデバイスは高いホール移動度を示した。</p> <p>(3) C-H 活性化を鍵とするチオフェン縮合ナフタレンジイミド誘導体の合成法を新たに開発した。この手法を用いて、合成した新規材料の吸収および酸化還元電位は、計算で予測されたものとよく一致していた。さらに、これらの材料を用いた有機薄膜トランジスタデバイスは、大気下で安定に駆動する n 型特性を示した。</p> <p>4. まとめ</p> <p>新規有機半導体材料の効率的な探索には、計算化学を用いた候補化合物のスクリーニングは必須であり、得られた実験結果を説明するためにも計算が役に立った。</p> <p>5. 今後の計画・展望</p> <p>密度汎関数法による単分子の最安定構造やフロンティア軌道のエネルギー準位を評価するだけでなく、分子動力学計算などの手法も取り入れ、分子集合体での分子配向や物性の評価も行う予定である。</p>
---	---

平成 30 年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

1. M. Nakano, K. Nakano, K. Takimiya, K. Tajima, “Two isomeric perylenothiophene diimides: physicochemical properties and applications in organic semiconducting devices”, *J. Mater. Chem. C*, **2019**, in press. (DOI: 10.1039/c8tc05577g)

【口頭発表】

1. 中野正浩, 瀧宮和男, 「チオフェン縮環ペリレンジイミドの開発と有機半導体材料への応用」, 第 45 回典型元素討論会, O-36, 2018 年 12 月, 新潟.
2. C. Wang, “Alkylthionation of Thienoacenes to Tune the Packing, Molecular Orientation and Semiconducting Properties”, 2018 MRS Spring Meeting & Exhibit, EP08.09.02, April **2018**, Phoenix, Arizona, USA.
3. C. Wang, H. Nakamura, K. Takimiya, “Alkylthionation of Thienoacenes to Tune the Packing, Molecular Orientation and Semiconducting Properties”, The 98th Annual Meeting 2018 of CSJ, 2I2-41, March **2018**, Funabashi, Japan.
4. J. Hamonnet, M. Nakano, K. Nakano, K. Takimiya, K. Tajima, “Novel highly efficient non-fullerene acceptor based on naphtho[2,3-*b*]thiophene diimide for organic solar cells”, The 65<sup>th</sup> JSAP Spring Meeting, 2018, March **2018**, 17p-G202-7, Tokyo, Japan.

【ポスター発表】

1. T. Ogaki, K. Takimiya, “Pyrene derivatives modified with small substituents as potential organic semiconductors”, The Ninth International Forum on Chemistry of Functional Organic Chemicals (IFOC-9), P-26, November **2018**, Tokyo, Japan.
2. N. Suzuki, K. Takimiya, “Structural Effects on Reversible Polymerization Behavior of Naphthodithiophene Diradicaloids”, The Ninth International Forum on Chemistry of Functional Organic Chemicals (IFOC-9), P-42, November **2018**, Tokyo, Japan.
3. N. Suzuki, K. Takimiya, “Structural Effects on Dynamic Polymerization Behavior of Naphthodithiophene Diradicaloids”, The 8th TOYOTA RIKEN International Workshop on Organic Semiconductors, Conductors, and Electronics, P12, October **2018**, Nagakute, Japan.
4. T. Ogaki, K. Takimiya, “Pyrene derivatives modified with small substituents as potential organic semiconductors”, The 8th TOYOTA RIKEN International Workshop on Organic Semiconductors, Conductors, and Electronics, P13, October **2018**, Nagakute, Japan.
5. C. Wang, H. Nakamura, H. Sugino, K. Takimiya, “Alkylthionation of Thienoacenes to Tune the Packing, Molecular Orientation and Semiconducting Properties”, 14th International Conference on Organic Electronics, June **2018**, Bordeaux, France.