



平成28年12月6日
岡山大学

高性能な有機電界効果トランジスタ材料の合成に成功 ー有機電子デバイスの実用化へ大きく前進ー

岡山大学異分野基礎科学研究所の西原康師教授、久保園芳博教授、森 裕樹助教、大学院自然科学研究科（理）博士後期課程の兵頭恵太大学院生の共同研究グループは、高性能な有機半導体材料として有用なピセン類縁体である“新材料 2,7-ジドデシルフェナントロ [2,1-b:7,8-b']ジチオフェン (C12-PDT-2)” の効率的な合成法の開発に成功しました。さらに、有機電界効果トランジスタ素子を作製したところ、多結晶薄膜において最大ホール移動度 $5.4 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ と極めて高い性能を得ることに成功しました。また、この要因は、均質な高い結晶性を持つ薄膜の形成と 最高被占分子軌道 (HOMO) の形状に由来するものであることを DFT 計算を用いて明らかにしました。本研究結果は 12 月 6 日 (英国時間午前 10 時)、英国の科学雑誌「*Scientific Reports*」に掲載されます。

本研究結果は、有機合成化学、計算化学、材料化学の三つの分野を融合して達成されたものであり、高性能材料を開発するための新たな知見が得られたものです。今回開発された合成手法を応用することで、高性能な含硫黄多環芳香族化合物を簡便に開発できるため、有機合成化学と有機材料化学の両分野に大いに貢献することが期待されます。

<本研究のポイント>

- 有機半導体は電子ペーパーやウェアラブルコンピュータへの用途が期待されている。そのため、簡便かつ安価に合成でき、高耐久性かつ高性能を示す有機半導体材料の開発が加速している。
- 新材料 C12-PDT-2 の開発に成功した。C12-PDT-2 は、安価な出発原料から簡便かつ短工程で合成することができ、大気安定性、熱安定性にも優れている。
- C12-PDT-2 を用いた有機電界効果トランジスタ (OFET) は、低電圧で駆動し、最大ホール移動度 $5.4 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ と極めて高い値を示した。高性能の要因が、均質で高い結晶性の薄膜を形成したこと、HOMO の形状にあることがわかった。
- 本研究結果は、高性能な有機半導体材料を創出するための材料設計指針となる。酸素や窒素、フッ素などの電子状態に大きな影響を及ぼす官能基や他の複素多環芳香族を有する材料の開発が進めば、有機薄膜太陽電池や有機 EL 材料に適した新たな材料の開発が期待される。

<背景・業績>



PRESS RELEASE

有機半導体は、無機半導体に比べて、安価で軽量、機械的柔軟性を兼ね備えた素子を作製することが可能です。中でも、有機半導体材料を活性層に用いた OFET は、次世代の電子ペーパーや RF-ID タグ、ウェアラブルコンピュータなどに応用することができるため、高性能な有機半導体材料を開発することは、極めて重要な研究課題の一つです。

本学異分野基礎科学研究所の西原教授らの研究グループは、これまでにパラジウム触媒を用いたクロスカップリング反応を駆使することで、種々の多環芳香族炭化水素、含硫黄縮合多環芳香族化合物の合成が可能であることを報告しています。

今回、西原教授らの共同研究グループは、これまでに開発した合成化学的手法を用いて、ピセン類縁体に移動度の向上を促進する長鎖のアルキル基を導入した、2,7-ジドデシルフェナントロ[2,1-*b*:7,8-*b'*]ジチオフェン (C12-PDT-2) の効率的な合成法を確立することに成功しました (図 1)。得られた化合物は、安価な出発原料から簡便かつ短工程で合成することができ、大気安定性および熱安定性にも優れているといった利点があります。さらに、合成した C12-PDT-2 を活性層として用い、ゲート絶縁体として ZrO₂ を使用した OFET 素子において、低電圧で駆動するほか、最大ホール移動度 5.4 cm² V⁻¹ s⁻¹ と極めて高い値を示すことが分かりました。高移動度を示した要因としては、発生したホールを効率よく流すことが可能な均質で高い結晶性の薄膜を形成したほか、C12-PDT-2 の HOMO の形状が大きく関与しています (図 2)。一般的に、キャリアの輸送は、分子の HOMO の軌道を介しておこなわれるため、隣接する分子間での HOMO の軌道の重なりが極めて重要です。今回開発した材料の HOMO の軌道は、節が少なく、分子間で効果的な軌道の重なりを実現することができたため、高い性能を発現することができたと考えています。このように、C12-PDT-2 は、簡便かつ安価で合成でき、高耐久性かつ高性能を示す有機半導体材料であることから、有機半導体材料を用いた実デバイスへの応用に適した材料であることを示しています。

<見込まれる効果>

本研究成果は、有機合成化学、計算化学、材料化学の三つの分野を融合して達成できたものであり、異分野を融合することの重要性を再認識する研究成果となりました。今後、硫黄だけではなく、酸素や窒素、フッ素などの電子状態に大きな影響を及ぼす官能基や他の複素多環芳香族を有する材料の開発が成功すれば、OFET 素子だけではなく、有機薄膜太陽電池や有機 EL 材料に適した材料を新たに創出することも可能です。また、本研究で得られた新たな知見は、OFET の実用化に耐えうるより高性能な有機半導体材料を創出するための材料設計指針となるものであり、さらなる高性能材料の開発が期待できます。



PRESS RELEASE

本研究は、独立行政法人 科学技術振興機構 「低エネルギー、低環境負荷で持続可能なものづくりのための先導的な物質変換技術の創出 (JST-ACT-C)」等の支援を受けて実施しました。

<発表論文情報>

論文名: "Transistor Properties of 2,7-Dialkyl-Substituted Phenanthro[2,1-b:7,8-b']dithiophene"

「2,7-ジアルキル置換フェナントロ[2,1-b:7,8-b']ジチオフエンのトランジスタ特性」

発表雑誌: *Scientific Reports*

著者: Yoshihiro Kubozono, Keita Hyodo, Shino Hamao, Yuma Shimo, Hiroki Mori, Yasushi Nishihara*

DOI: 10.1038/srep38535

<お問い合わせ>

岡山大学異分野基礎科学研究所

教授 西原 康師 (にしはら やすし)

(電話番号) 086-251-7855

(FAX番号) 086-251-7855



PRESS RELEASE

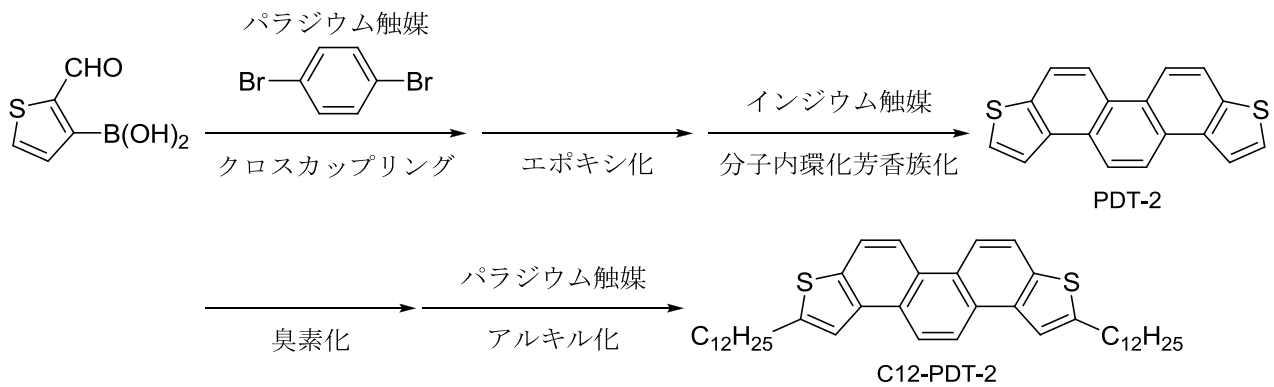


図 1. 開発した C12-PDT-2 の合成経路および化学構造式

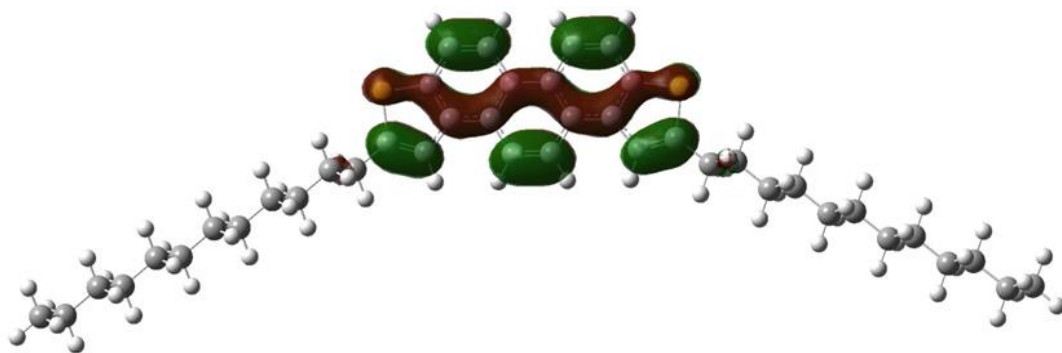


図 2. C12-PDT-2 における HOMO の軌道図