

分子科学会優秀ポスター賞・日本物理学会学生優秀発表賞を受賞して

凝縮系物性研究部門 森研究室 博士後期課程2年 伊藤 雅聡

去る2022年9月に慶應義塾大学で開催された第16回分子科学討論会にてポスター発表を行い、分子科学会優秀ポスター賞を受賞する栄誉に与りました。また、2023年3月にオンラインで開催された2023年日本物理学会春季大会にて口頭発表を行い、日本物理学会学生優秀発表賞(領域7)をいただくことができ、大変光栄に思います。受賞対象となった発表は、大気安定な d/π 共役系アンバイポーラ半導体材料の開発に関するものであり、以下、この内容を簡単にご紹介させていただきます。

有機太陽電池をはじめとした有機エレクトロニクスデバイスの発展を担う次世代型の半導体材料として、プラスの電荷をもつキャリア(正孔)を伝導するp型半導体と、マイナスの電荷をもつキャリア(電子)を伝導するn型半導体のどちらとしても機能する「アンバイポーラ半導体」が注目されています。しかし、このアンバイポーラ半導体の特性を大気下でも安定に発現する材料の実現は難しく、こうした特性の観測はこれまで、別々のp型半導体とn型半導体から成る複合材料や一部のポリマー材料などに限られていました。また、複合材料においては界面におけるキャリア伝導効率の低下が、ポリマー材料においては伝導機構の解明や性能向上に必要である詳細な構造情報の把握が困難である点が、依然として課題となっていました。そこで本研究では、 d/π 共役系分子であるニッケルジチオレン錯体に着目し、この骨格に適切な置換基を組み合わせることによって、大気安定かつ、複合材料やポリマー材料における障害をクリアする単一成分・低分子型材料を設計しました。合成した錯体群は、詳細な構造的解析と高秩序層の形成を可能にする高い結晶性を共通して示しました。単結晶X線構造解析の結果、置換基のわずかな伸長による分子形状の微細な変化に伴い、分子積層構造が劇的に変化することが見出されました。この分子積層構造の変化により、隣接分子間における有効な相互作用が結晶中の2方向で形成可能となることが理論計算から示され、実デバイスにおける安定的なキャリア伝導を可能とする2次元的なキャリア伝導パスの確保が示唆されました。また、置換基のわずかな伸長は有機溶媒への溶解性に基づく薄膜加工性の向上ももた

らし、実際に溶液塗布プロセスを適用して作製した結晶性薄膜を用いた電界効果トランジスタ(FET)の特性評価においては、アンバイポーラ型の電荷輸送特性を大気下でも安定的に観測することに成功しました。本研究成果は、アンバイポーラ半導体材料の性能向上に向けた新たな分子設計指針を与えるものであり、次世代型有機エレクトロニクスデバイスの発展や、溶液プロセスを用いた簡便かつ低コストなデバイス製造の実現に対する貢献が期待されます。

本発表にあたり、森研究室の森初果教授、藤野智子助教のほか、物質設計評価施設の尾崎泰助教授、産業技術総合研究所の東野寿樹主任研究員、大阪公立大学の牧浦理恵准教授をはじめとする、分野を跨る多くの方々のご協力ならびにご指導を頂きました。この場をお借りしまして、心より御礼申し上げます。

参考文献

M. Ito, T. Fujino*, L. Zhang, S. Yokomori, T. Higashino, R. Makiura, K. J. Takeno, T. Ozaki, H. Mori*, *J. Am. Chem. Soc.*, **145**, 2127-2134 (2023).

