

大気暴露後も優れたアンバイポーラ性を示す有機半導体を開発 ～合成が容易なワイドバンドギャップの新分子構造～

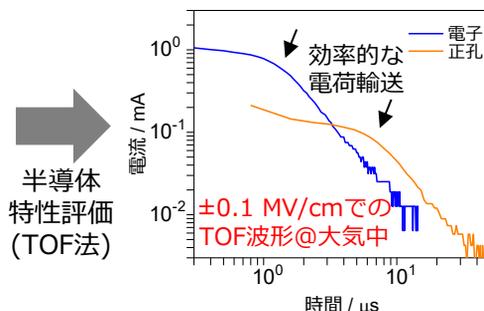
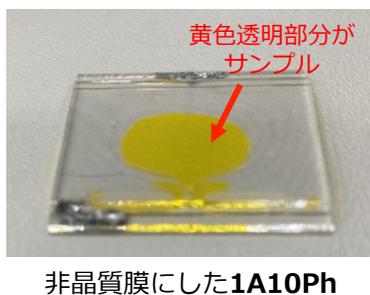
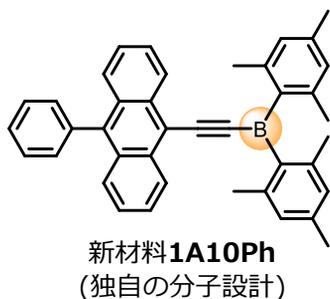
可視光電子デバイスに求められる電子・正孔の両方を輸送可能なアンバイポーラ型のワイドバンドギャップ有機半導体材料は、多くの場合でその合成が煩雑であり、尚且つ大気暴露すると電荷輸送特性が著しく劣化するという根本的課題を有していました。

地方独立行政法人東京都立産業技術研究センター（都産技研）は、国立大学法人東京科学大学（科学大）と共同で**合成が容易で、大気暴露後もその非晶質膜が優れた電子・正孔輸送特性**を実現する**ワイドバンドギャップ**のアンバイポーラ型有機半導体を開発しました。本成果は有機ELなど光電子デバイスの安定性や設計自由度の向上に貢献することが期待されます。

開発のポイント（技術の詳細は次ページに記載されています）

- ◆ 市販原料から**3ステップ**かつ**高収率(～66%)**で合成が可能。
- ◆ HOMO準位*:-5.6 eV, LUMO準位*:-3.0 eVの**ワイドバンドギャップ(2.6 eV)**。
- ◆ **均一な非晶質膜**の形でデバイス応用が可能(ガラス転移温度:79 °C)。
- ◆ 非晶質膜は**大気暴露後もほぼトラップフリーのアンバイポーラ電荷輸送**を維持(12時間以上)。

*HOMO準位：正孔を輸送する経路のエネルギー， LUMO準位：電子を輸送する経路のエネルギー



開発した両極性有機半導体材料の分子構造と大気中で測定した電荷輸送特性(TOF波形)

論文誌名：ACS Materials Letters (2024年インパクトファクター 9.6)

掲載日：2025年5月12日 (オンライン版)

論文タイトル：An Ambipolar Alkynylborane Compound with Nearly Trap-Free Charge-Carrier Transport under Ambient Air Conditions ※掲載号のSupplementary Coverに採用されました。

著者：三柴健太郎(都産技研、科学大)*, 永田晃基(都産技研), 田中裕也(科学大), 飯野裕明(科学大)* *責任著者

DOI : <https://doi.org/10.1021/acsmaterialslett.5c00288>

関連特許：特許第7372652号

※本研究はJSPS科研費JP22K05074の助成を受けて実施されました。

都産技研では本技術の製品化を目指し、共同研究・開発を行っていただける企業を募集しています。興味のある方は下記までお問い合わせください。

【お問い合わせ】

地方独立行政法人東京都立産業技術研究センター

マテリアル技術グループ 海老澤 TEL 03-5530-2660

経営企画室 大原 TEL 03-5530-2521 MAIL koho@iri-tokyo.jp

<https://www.iri-tokyo.jp/>

本研究の概要

本研究では、アルキニルボラン(-C≡C-BR₂)という特殊な有機ホウ素骨格を用いる分子設計を採用することで、大気暴露後も高特性を示すワイドバンドギャップのアンバイポーラ型有機半導体材料の開発に成功しました。本成果は有機ELなど光電子デバイスの安定性や設計自由度向上への貢献が期待されます。

◆背景◆

有機ELや有機太陽電池といった薄型軽量の有機光電子デバイスの実用化が近年急速に進んでいます。その中で、電子と正孔の両方を輸送できるアンバイポーラ型有機半導体は、デバイスの高性能化を担う鍵として注目されています。しかし、可視光デバイスに必要なワイドバンドギャップ(>2.5 eV)の材料は、酸素や水分によって電荷輸送特性(特に電子輸送)が劣化しやすく、大気中で安定動作する材料の開発が課題となっていました。これはデバイスの安定性や設計・製造プロセスを制限する要因でもありました。

本研究ではこの課題を克服すべく、独自の分子設計アプローチを採用し、これまで困難とされてきた高い大気安定性を有するワイドバンドギャップのアンバイポーラ型有機半導体の開発に取り組みました。

◆本研究によって得られた成果◆

本研究では、アンバイポーラ性発現の為にアルキニルボランとアントラセンを組み合わせる分子設計*を採用しました。さらに、大気安定性に影響する分子凝集構造の制御を目的にアントラセン環にフェニル基の導入を行い新規化合物**1A10Ph**を合成しました(図1)。**1A10Ph**はHOMO/LUMO準位が真空準位換算でそれぞれ-5.6/-3.0 eVに位置しており、ワイドバンドギャップ(2.6 eV)の材料となっています。我々はこの材料の非晶質膜における電荷輸送特性を、光励起電荷キャリアの輸送過程を直接観測する飛行時間(TOF)法を用いて評価しました。その結果、**1A10Ph**は酸素や水分によって電荷キャリア輸送が阻害され難く、大気暴露後も高効率の電子・正孔輸送を実現できることが示されました。

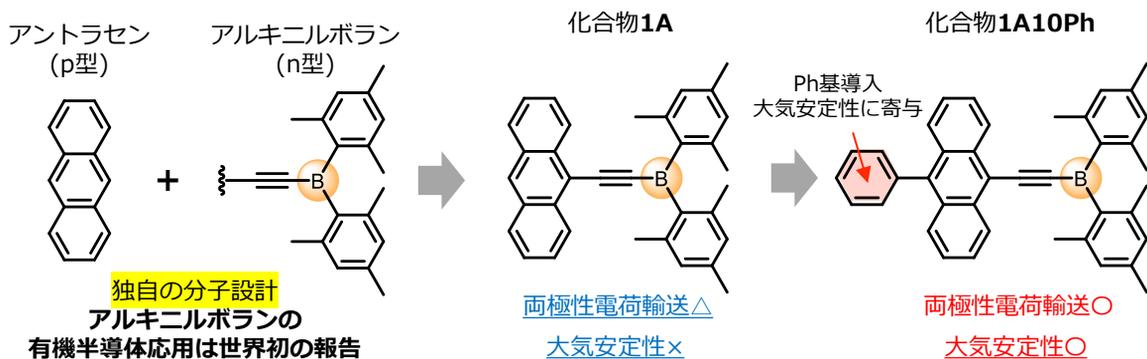


図1. 開発した両極性有機半導体**1A10Ph**の分子構造と設計のコンセプト

開発した**1A10Ph**は合成が容易なだけでなく、耐熱性が高いため融解液の急冷などで均一な非晶質膜を得ることが可能です。図2はこの非晶質膜の電荷輸送特性を大気中、0.1 MV/cmの低電界強度でTOF法により評価した結果です。過渡電流波形の変曲点は、膜内で電子と正孔がほとんどトラップされずに輸送されていることを示します。この波形解析から**1A10Ph**の非晶質膜は低電界強度でも比較的高い電子/正孔移動度(10⁻³/10⁻⁴ cm²/Vs)を発揮し、大気中でほぼトラップフリーのアンバイポーラ電荷輸送を示すことが明らかとなりました。一般的に、このような浅いLUMO準位(>-3.6 eV)を持つワイドバンドギャップの有機半導体は、特に電子輸送が微量の酸素や水分によって著しく阻害されますが、**1A10Ph**は高い耐性を有しています。この成果は有機ELや有機太陽電池の安定性、設計自由度の向上、さらに低コストのデバイス製造プロセスの実現に貢献することが期待されます。

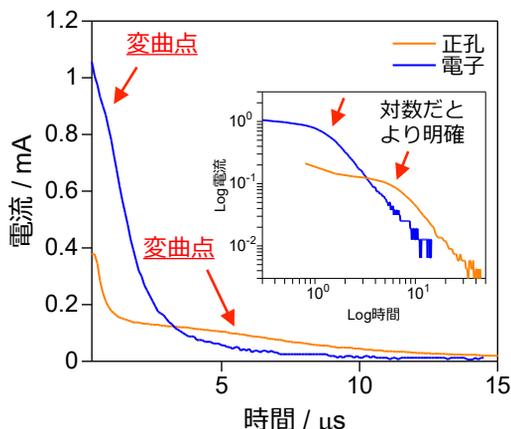


図2. 大気中(6~12h暴露)、電界強度±0.1 MV/cmにおける**1A10Ph**非晶質膜のTOF波形。明確な変曲点は電子/正孔が分散せずに非晶質膜内を輸送されたことを示す。

◆今後の展開◆

本研究で得られた成果を活用いただける中小企業との共同研究を募集しています。

*過去の関連プレス発表資料(2021年) : <https://www.iri-tokyo.jp/news/press-2021-02-25-3/>

<https://www.iri-tokyo.jp/>