

(様式第5号)

有機エレクトロニクスデバイスを指向した有機半導体薄膜における自己組織ナノ構造の GI-XRD による精密解析
GI-XRD Analysis for Self-assembled Nanostructures of Organic Semiconductor Thin Films Toward Organic Optoelectronic Devices

込山 英秋,^{1,2} 大山 達也,¹ 森 達哉,¹ 安田 琢磨¹
Hideaki Komiyama,^{1,2} Tatsuya Oyama,¹ Tatsuya Mori,¹ and Takuma Yasuda¹

¹九州大学 稲盛フロンティア研究センター,
²九州大学 カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所
¹INAMORI Frontier Research Center, Kyushu University,
²WPI-I2CNER, Kyushu University

- ※1 先端創生利用（長期タイプ）課題は、実施課題名の末尾に期を表す（Ⅰ）、（Ⅱ）、（Ⅲ）を追記してください。
- ※2 利用情報の公開が必要な課題は、本利用報告書とは別に利用年度終了後2年以内に研究成果公開〔論文（査読付）の発表又は研究センターの研究成果公報で公表〕が必要です（トライアルユースを除く）。
- ※3 実験に参加された機関を全てご記載ください。
- ※4 共著者には実験参加者をご記載ください（各実験参加機関より1人以上）。

1. 概要

本研究では、有機薄膜太陽電池および有機電界効果トランジスタの活性層に用いる有機半導体薄膜の自己組織化ナノ構造を斜入射 X 線回折 (GI-XRD) にて評価した。面外方向に散乱ピークが観測され、ラメラ構造を形成していることが明らかとなり、今後の有機半導体の分子設計に有用な指針を得ることができた。

(English)

Self-assembled nanostructures in organic semiconductor thin films were evaluated with grazing-incidence X-ray diffraction (GI-XRD) measurements, which can be utilized for active layers of organic solar cells (OSCs) and organic field-effect transistors (OFETs). The out-of-plane profile exhibited a scattering peak, indicating the edge-on orientation of lamella structure. The obtained results provide useful guideline of molecular designs for achieving high-performance OSCs and OFETs.

2. 背景と目的

近年、有機エレクトロニクス分野が飛躍的に発展し、その中核を担う有機半導体材料の重要性は拡大の一途である。有機半導体の潜在的な機能を最大限に発揮させるためには、分子の高次集積構造をナノレベルから巨視的なスケールに渡って設計・制御していくことが求められる。本研究では、有機半導体薄膜中の分子レベルから実薄膜レベルの間に介在するメゾスコピック領域における分子集合構造を GI-WAXS および GI-SAXS にて解明することを目的とする。そして、分子集合構造と有機トランジスタおよび有機薄膜太陽電池のデバイス特性の相関性を評価することで、有機半導体デバイスの高機能化・高性能化を追求する。

3. 実験内容 (試料、実験方法、解析方法の説明)

試料となる有機半導体薄膜は、スピニング法またはディップコーティング法により、シリコンウエハ基板上に製膜した。膜厚はおよそ100 nmとした。BL11にて、斜入射小角X線散乱(GI-SAXS)および斜入射広角X線散乱(GI-WAXS)測定を行った。エネルギーは8 keV、カメラ長はGI-SAXSでは約1000 mm、GI-WAXSでは約400 mmであった(図1)。得られた2D画像のデータ解析は、Fit2Dを用いた。

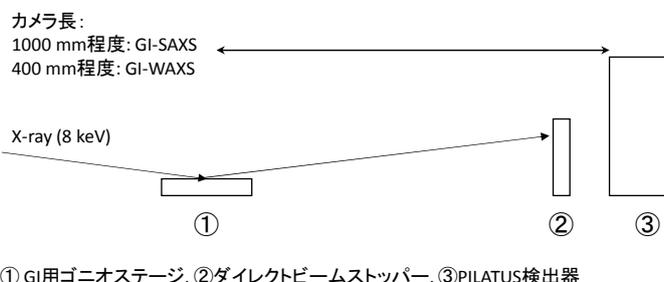


図1. 実験レイアウト

4. 実験結果と考察

図2に有機トランジスタ用に開発した有機半導体薄膜のGI-SAXS 2D画像と面外プロファイルを示す。 q 値 2.1 nm^{-1} に散乱ピークが観測され、3.0 nm 周期のナノ構造を形成していることが明らかとなった。用いた有機半導体分子の長軸の長さが約3.0 nmであることから、基板に分子が直立したラメラ構造を形成していることが分かった。

GI-WAXSでは、有機薄膜太陽電池に用いる有機半導体活性層中の自己組織化ナノ構造を評価した。独自に開発したドナー分子とフルーレン誘導体からなるバルクヘテロ接合型の混合薄膜をサンプルとした。図3に得られたGI-WAXS 2D画像と面外プロファイルを示す。 q 値 0.35 \AA^{-1} に散乱ピークが観測され、ドナー分子が周期17.8 Åのラメラ構造を形成していることが明らかとなった。さらに、面外方向にのみ散乱が観測されたことより、ドナー分子がedge-on配向していることが分かった。本測定ではセットアップの都合上、 π - π スタッキングに相当する約3.6 Åの散乱を観測することができなかった。

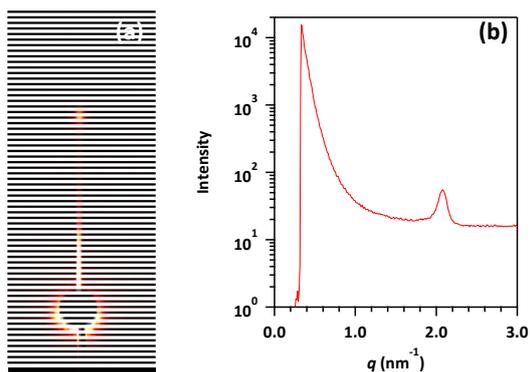


図2. 有機トランジスタ用の有機半導体薄膜のGI-SAXS (a) 2D画像と(b)面外プロファイル。

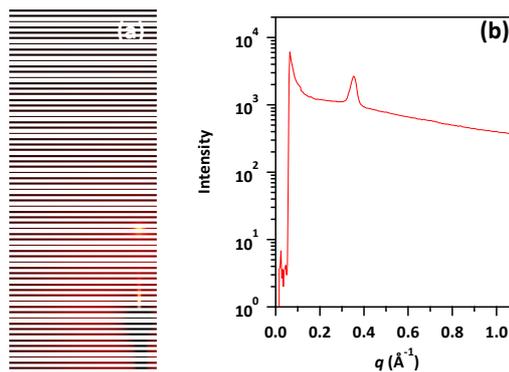


図3. 有機薄膜太陽電池用の有機半導体薄膜のGI-WAXS (a) 2D画像と(b)面外プロファイル。

5. 今後の課題

いずれのサンプルも広角領域に現れる π - π スタッキングに相当する散乱を評価することが必要である。有機半導体材料の結晶性および配向性をさらに精密に解析することにより、分子設計の観点から有機エレクトロニクスデバイスの高効率化を図りたいと考えている。

6. 参考文献

特になし

7. 論文発表・特許 (注: 本課題に関連するこれまでの代表的な成果)

特になし

8. キーワード (注: 試料及び実験方法を特定する用語を2~3)

GI-SAXS、GI-WAXS、有機半導体薄膜

9. 研究成果公開について（注：※2に記載した研究成果の公開について①と②のうち該当しない方を消してください。また、論文（査読付）発表と研究センターへの報告、または研究成果公報への原稿提出時期を記入してください（2016年度実施課題は2018年度末が期限となります）。
長期タイプ課題は、ご利用の最終期の利用報告書にご記入ください。
トライアルユースのため該当なし