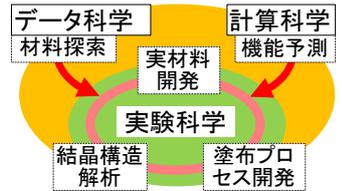


・研究目的・概要

有機材料は、構成する分子および集合体の多様性により、それらが示す多彩な物性という観点から学術的な興味をもたれていることはもちろんのこと、デバイス開発の材料としても応用面から大きな注目を集めている。機能高度化のための最適作成条件の探索は広く行われるが、新規分子の開発を含む基礎的な理解から機能発現を最適化するという部分は、とすれば後回しにされがちである。最近ではこれらの機能性有機物を用い、高品質な薄膜の作製技術が発展し、構造と物性に対応づけた議論が行えるようになってきた。一方で、有機分子材料は分子の設計自由度に加え、集合形態の自由度が高く、集合化することではじめて物性が確立する集合体では、物性の最適化と材料設計の間に直接的な相関をもたせることが困難である。このギャップを埋めるために、既存のデータベースおよび理論計算を活用し、新規材料探索を効率よく進め、新規有機エレクトロニクス材料の探索を加速することを目的として研究を推進している。

・実験ステーション: PF BL-7C, 8A, 8B

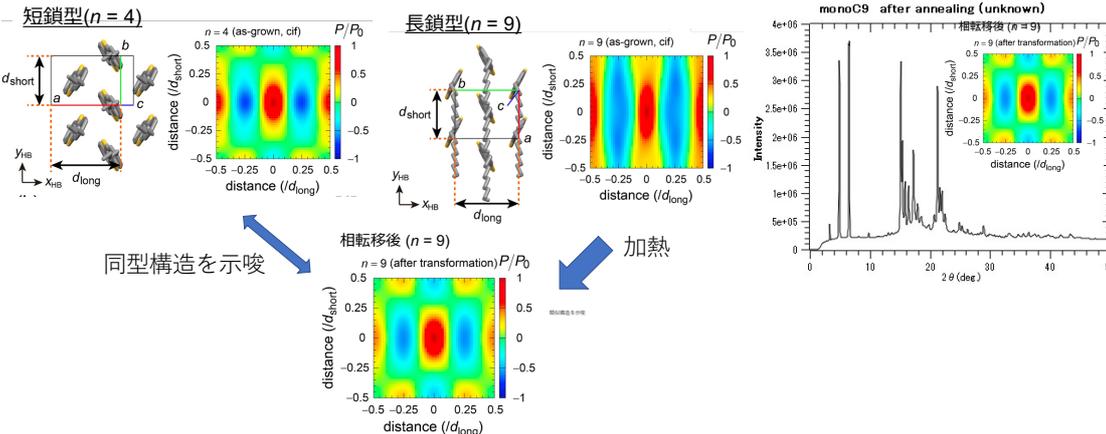
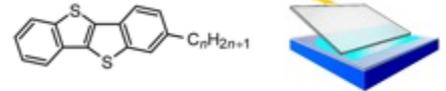


・2021年度の進捗状況

基板の上に作製された薄膜試料に対する構造解析

・ mono-BTBT-Cn

アニールにより、長鎖型から短鎖型へ構造相転移  
構造相転移に伴い、移動度も大きく変化することから、構造と特性に大きな関連があると考えられる。  
構造相転移に伴い、結晶性が劣化し、回折ピークがブロードになり、相転移後の構造決定が困難



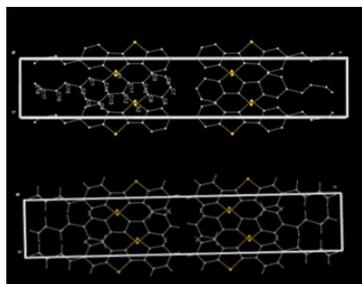
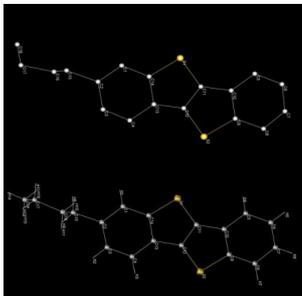
粉末試料(薄膜試料から作成)の回折を La bail 法によりピーク分離し回折強度を算出 (昨年度報告)

薄膜試料の構造決定

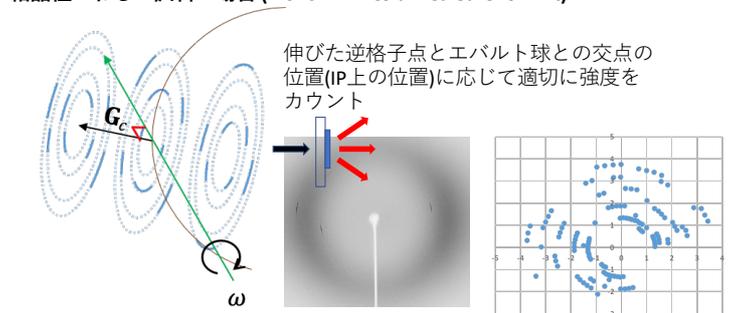
基板による入射X線強度の減衰、ビーム照射退角の角度変化、Lorentz-Polarization calibration などの補正を行い、観測可能反射数が限られた条件での構造解析(剛直な置換基は構造固定)

結晶性のよい試料の場合 (mono-BTBT-C4 190 nm t)

薄膜試料の構造解析結果 (下はバルク単結晶の解析結果)



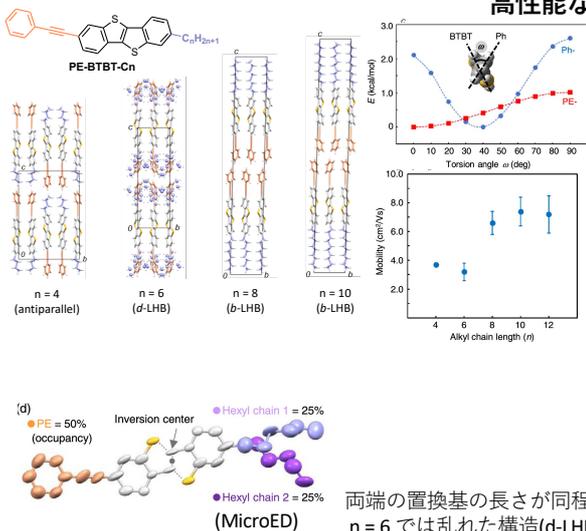
結晶性のわるい試料の場合 (mono-BTBT-C9 annealed 510 nm t)



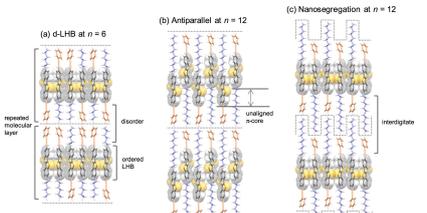
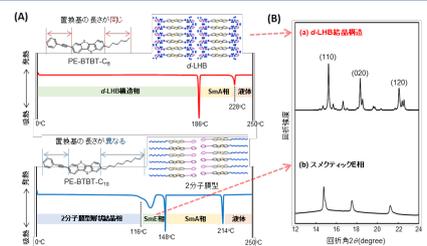
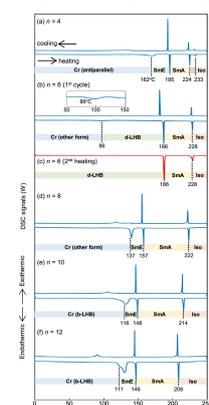
$a: 8.19\text{\AA}, b: 5.8764\text{\AA}, c: 32.111\text{\AA}, \beta: 92.698\text{deg}, (SPG: P21/a)$   
Residuals: R1 ( $I > 2.00\sigma(I)$ ): 0.0850, (All reflections): 0.0947

$a: 43.327, b: 5.755, c: 8.256, \beta: 90.663, (SPG: P21/c)$   
詳細な構造は解析中

高性能な液晶性有機半導体の開発



加熱による液晶相の発見



の  $n=6$  でみられる乱れた構造(d-LHB)は、2分子モデル(上の例は  $n=10$ )で出現する SmE 層の構造に類似