PF S型課題報告 2020S2-001

有機エレクトロニクス材料開発のための構造物性

KEK 物質構造科学研究所 放射光科学第1研究系・熊井 玲児

 ・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、とも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、構造と物性を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, 4C



2022年度の進捗状況



S. Arai et al., Phys. Rev. Mater., 7, 025602 (2023).
K. Nikaido et al., Adv. Mater. Interfaces, 9, 2201789 (2022).
S. Matsuoka et al., J. Mater. Chem. C, 10, 16471-16479 (2022).
Y. Shimoi et al., J. Mater. Chem. C, 10, 16471-16479 (2022).