

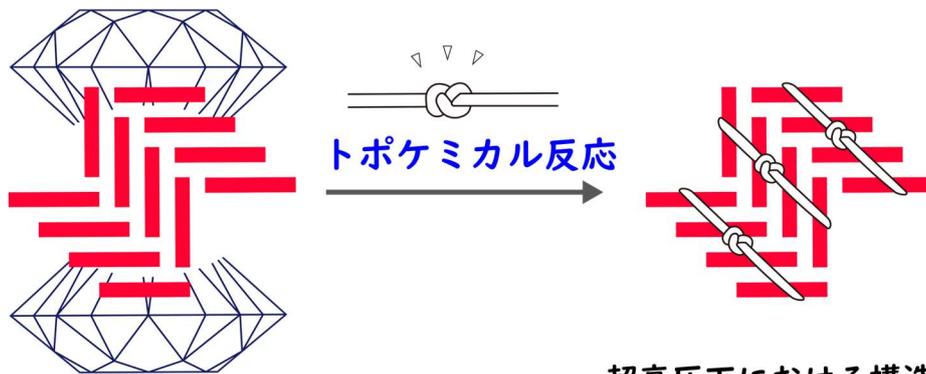
トポケミカル反応を利用した有機半導体の高密度集積構造の固定化

大阪大学大学院基礎工学研究科 助教 桶谷 龍成

分子を高密度に集積させる一般的な手法である「結晶化」では秩序構造が分子の熱力学的性質に依存しており、分子間空隙や結晶構造を意のままに操ることは難しい。例えば、剛直な π 共役系化合物の場合、CH/ π や π/π 相互作用が支配的に働くためヘリンボーン型のパッキング構造が生じやすい。また分子間距離は原子のファンデルワールス半径に起因する制限があり、結晶化以上に分子を高密度に集積する方法はない。

一方で、 π 共役系化合物の圧力印加時の構造は、常圧では成しえない密な分子間空隙を実現し、分子間相互作用が大きくなり物性が変化する。テトラセンやペンタセンの単結晶に圧力を印加すると、分子間の軌道の重なりが大きくなり、光電流が圧力に比例して増加することが知られている。このように有機分子性結晶に対し圧力を印加すると、分子間空隙が小さくなった構造が得られ、常圧で起こりえない物性を引き出すことが可能となる。

本研究は有機半導体特性を示す π 共役系化合物の分子性結晶を用いた超高压条件でのトポケミカル反応により、分子間空隙を極限まで小さくした集積構造を固定化することを目指す。分子性結晶はその柔軟性から圧力によって分子間空隙が可逆的に変化する。超高压における密なパッキング構造を常圧で実現するため、超高压条件での重合反応を行い、集積構造の固定化を目指す。具体的には、分子配列の制御された π 共役系化合物の結晶を用いて、ダイヤモンドアンビルセル (DAC) 内の超高压化にてトポケミカル反応を行う。超高压という極限条件から分子性結晶の集積構造にアプローチすることにより、熱力学的平衡の結果として得られる構造を超えた密度の構造体を実現することを目指す。



ダイヤモンドアンビルセル

超高压下における構造を
維持した π 共役構造体

図. 本研究で目指す集積構造の固定化。DAC に封じた π 共役系化合物の単結晶を用いて、超高压下でのトポケミカル反応によりパッキング構造を固定化する。

【実用化が期待される分野】

有機エレクトロニクス、高分子材料など