

実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新
2018年度採択研究代表者

2022年度
年次報告書

長谷川 達生

東京大学 大学院工学系研究科
教授

実験・計算・データ科学融合による塗布型電子材料の開発

主たる共同研究者:

熊井 玲児 (高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 教授)

堀内 佐智雄 (産業技術総合研究所 電子光基礎技術研究部門 上級主任
研究員)

松井 弘之 (山形大学 大学院有機材料システム研究科 准教授)

米倉 功治 (東北大学 多元物質科学研究所 教授)

研究成果の概要

第五年度の本年度も、昨年度に続き、計算・データ科学により塗布型電子材料の結晶構造・電子機能を予測する手法開発、デバイス製造に最適な実材料開発、製膜プロセス高度化を一体化した研究を進展させた。高精度量子化学計算を用いた段階的結晶構造最適化法の高度化を進め、ポリアセン系列の4つの類型構造とモノアルキル BTBT の多型構造再現に成功するとともに、手法の特徴を活かしたポテンシャルマップ解析により各構造の安定性の起源を明らかにした。結晶構造DBを用いた物質探索では、巨大双極子モーメントを有する強誘電体の候補抽出、原子間移動積分にもとづく半導体の候補抽出と、AI 支援により光学特性を予測する学習モデルを構築した。実材料開発では、層状有機半導体の系統的開発をさらに進め、長鎖アルキル置換効果による高性能化・置換基による積層構造制御・分子混合による高移動度相の発現効果をそれぞれ見出した。塗布型強誘電体では、強誘電・反強誘電・ハイブリッド状の多様な分極反転モードが現れる現象を見出した。放射光による高度結晶構造解析では、積層構造様式の変調が可能な層状有機半導体について、単結晶薄膜による消滅則と等価反射強度の関係から積層様式を正しく評価する手法開発を進めた。電子線結晶構造解析では、構造決定の難しい薄膜試料について、回折データへの分子置換法導入と、X 線自由電子レーザーによる回折データを用いる手法により構造決定に成功した。デバイス開発では、フィールドプレート電極を有する新たな素子構造により、世界最高利得の印刷型有機トランジスタ増幅回路の開発に成功した。一昨年度開発した高急峻スイッチング TFT の性能を決定づける要因について、絶縁膜・半導体材料の効果を明らかにした。さらに液晶相を介した層状有機半導体混合系の無溶媒塗布製膜、及び多軸性分子強誘電体のスイッチングにおける分極反転挙動可視化に成功した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Y. Hemmi, Y. Ikeda, R. A. Sporea, S. Inoue, T. Hasegawa, and H. Matsui, “Printed 700 V/V gain amplifiers based on organic source-gated transistors with field plates”, *Adv. Electron. Mater.*, doi: 10.1002/aelm.202201263 (2023).
- 2) Y. Uemura, S. Matsuoka, S. Arai, J. Harada, and T. Hasegawa, “Intersecting multiaxial domain walls in plastic ferroelectric crystal films”, *Phys. Rev. Mater.* **7**, 035601 (2023).
- 3) S. Horiuchi, H. Minemawari, and S. Ishibashi, “Competition of polar and antipolar states hidden behind a variety of polarization switching modes in hydrogen-bonded molecular chains”, *Mater. Horiz.*, doi: 10.1039/D2MH01530G (2023).
- 4) S. Arai, S. Inoue, M. Tanaka, S. Tsuzuki, R. Kondo, R. Kumai, and T. Hasegawa, “Temperature-induced transformation between layered herringbone polymorphs in molecular bilayer organic semiconductors”, *Phys. Rev. Mater.* **7**, 025602 (2023).
- 5) Tatsuo Hasegawa and Satoru Inoue, “Extremely sharp switching operation of printed transistors using highly layered crystalline organic semiconductors”, *JSAP Review*, doi: 0.11470/jsaprev.220206 (2022).