

研究成果最適展開支援事業 (A-STEP) FS ステージ (シーズ顕在化) 事後評価報告書

プロジェクトリーダー (企業責任者) : (株) カネカ

研究責任者 : 大阪大学 茶谷 直人

研究開発課題名 : 次世代有機EL材料としてのベンゾシロール誘導体の開発

1. 研究開発の目的

持続可能な低炭素社会の実現に向けて有機ELデバイスの高効率化・省エネ化に資する技術開発は重要である。我々は有機ELデバイスの発光効率向上につながる、高移動度電子輸送材料の実現を目的として本研究開発を開始した。有機半導体材料として注目されているケイ素含有5員環共役ジエン構造を持つシロール骨格をターゲットとし、大阪大学が開発した新規合成技術を用いて従来法では合成できなかった多種類のベンゾシロール誘導体を合成することによりライブラリ形成し、(株)カネカにおいてデバイス化・物性測定を進める共同研究により次世代高効率有機EL材料として適用可能な化合物の発掘を目指した。

2. 研究開発の概要

①成果

大阪大学にて開発されたロジウム触媒反応を利用することにより、構造自由度の高いベンゾシロール誘導体入手容易な原料から合成する技術を確立し、47種を合成してライブラリを構築した。分子軌道計算によるシミュレーションからそれぞれの誘導体について電子輸送材料としてのポテンシャルを見積り、有望化合物をピックアップした。Time of Flight 法による電子移動度測定から実用に近いレベルの特性を有するベンゾシロール誘導体を見出した。有機ELデバイスとしての特性は確認できていないが、広範な分子設計が可能であることからポテンシャルは高いと考えており、今後の展開が期待できる。

②今後の展開

今回のフィージビリティスタディにより、ベンゾシロール系有機半導体において高いキャリア移動度を発現するための設計指針が導かれ、またそれを具現化するための新しい合成手法を確立することができた。今後は本成果をさらに発展させ、有機EL用電子輸送材料として利用する場合のデバイスとしての性能発現を目指し、またさらには他の有機エレクトロニクス分野への応用も視野に入れながら、産学連携による検討継続を考えている。

3. 総合所見

当初の目標に対し、期待したほどの成果は得られなかった。種々のベンゾシロール誘導体を合成する目標はかなりの程度達成されているが、その誘導体の有機EL材料化、物性制御、改良等については、当初の目標に到達していない。産学において、物性評価結果をフィードバックして、新たなベンゾシロール誘導体の合成の方向付けをするサイクルの実現が期待される。