

2024 年度年次報告書

材料創製および循環プロセスの革新的融合基盤技術の創出とその学理構築

2024 年度採択研究代表者

岡本 敏宏

東京科学大学 物質理工学院
教授

物質循環型半導体集積回路の創製

主たる共同研究者:

福島 和樹 (京都工芸繊維大学 繊維学系 教授)

渡辺 豪 (北里大学 未来工学部 教授)

研究成果の概要

本研究では、物質循環型半導体集積回路を実現するための必要要素として高性能かつ物質循環型 n 型有機半導体材料の開発や、ゲート絶縁膜を指向した物質循環型絶縁性高分子材料の検討を実施した。

n 型有機半導体材料の開発では、化学的に安定な中心骨格を基盤に、高い電子移動度と良好な塗布単結晶製膜性を示す材料設計に取り組んだ。異なる環状置換基を併せ持つ、非対称系 n 型有機半導体材料群に着目して合成スキームを確立した。合成した材料について塗布単結晶化およびデバイス評価を実施したところ、現時点で既存の n 型有機半導体の中でも特に目標の達成に有望な特性が観測された。今後は集積回路への組み込みに向け、設計した非対称系 n 型有機半導体材料に適した溶剤やプロセス開発へと展開する。また、機械学習や分子力学計算・分子動力学計算を組み合わせた独自の予測法に基づき、関連する非対称系 n 型有機半導体材料群の中から有望な分子構造の知見が得られた。実際に、予測された候補分子を合成することで予測法の有効性の検証をおこなうとともに、さらに新規な分子の予測を進めている。

また、ゲート絶縁膜としての利用を目指した物質循環型絶縁性高分子材料の合成・評価検討を実施した。分解・アップサイクル可能な高分子を一つ選定し初期評価を実施したところ、既存材料と同程度の耐電圧や比誘電率を持つことが示唆された。また有機トランジスタのゲート絶縁層として用いたところ、ヒステリシスの小さい良好な p 型素子に有用であった。電子材料に向けた耐熱性や純度の向上を図るため合成法の改善検討をおこなったところ、高分子量化・高純度化・スケールアップが可能な合成条件に知見を得ることができた。今後は、新規高分子材料の設計・開発を実施し、並行して、集積回路応用や物質循環も見据えた作製・回収プロセスの検討をおこなう。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Seki, T., Shinozaki, Y., Ito, R., Sato, S., Takeya, J., Okamoto, T., Watanabe, G.* “Machine Learning Approaches for Determining Molecular Packing of Organic Semiconductors: Toward Accurate Crystal Structure Prediction.” *ChemRxiv*, DOI: 10.26434/chemrxiv-2024-pvk9d (2024).