

2026年3月27日

報道関係者各位

北里大学  
東京科学大学  
科学技術振興機構 (JST)

## なぜ三脚型分子は固体表面上できれいに並ぶのか？

—トリプチセン有機薄膜の自己組織化メカニズムを分子動力学で解明—

### 発表のポイント

- ・プロペラ状骨格をもつ三脚型トリプチセン誘導体の自己組織化薄膜について、全原子分子動力学 (MD) シミュレーションにより、表面上での分子配向と秩序化の「動的プロセス」を分子レベルで初めて可視化・解明
- ・分子が厚く積み重なったバルク相では分子の向きが互い違いに配向する「反平行配向」が安定であるのに対し、超薄膜相では固体表面の影響で分子の向きが揃う「平行配向」へと優先的に切り替わるメカニズムを発見
- ・熱アニーリングによる「段差状構造から平坦 (へいたん) な膜への自己修復」および高秩序化の過程を再現し、そのメカニズムを定量的に実証
- ・置換基パターンが膜の安定性を左右することを突き止め、高性能な有機薄膜デバイス開発に向けた合理的な“分子設計指針”を提示

### ■ 概要

北里大学未来工学部の渡辺豪教授、同大学大学院理学研究科修士課程の新田海統さん (研究当時)、東京科学大学総合研究院自律システム材料学研究センターの福島孝典教授、同大学総合研究院化学生命科学研究所の庄子良晃准教授の研究チームは、三脚型トリプチセン分子が薄膜を形成するときに、膜の厚みやトリプチセン分子の種類、さらには固体基板があるかどうかによって、分子の並び方にどのように影響するかを全原子分子動力学 (MD) シミュレーションで明らかにしました。

これまでに、長鎖の置換基が導入されたトリプチセン分子は、基板種によらず、 $\text{cm}^2$ スケールの高秩序薄膜 (2次元の入れ子六方充填+1次元積層) を形成することが示されてきました (*Science* 2015, 348, 1122)。この薄膜は、スピコートや真空蒸着などの簡便な製膜法で作製でき、例えば高分子膜上に薄膜を作製し、その上に有機半導体を積層すると秩序化さ

れた半導体層が形成され有機トランジスタ性能が向上することも報告されています (*Nat. Nanotechnol.* **2018**, *13*, 139)。一方で、単結晶では隣接分子が逆向きの反平行配向が観測されるのに対し、固体表面上の薄膜では分子は平行配向することが有利と考えられるなど、「なぜ固体表面で分子の向きが変わるのか」という分子機構は十分に分かっていませんでした。

そこで本研究では、長鎖アルコキシ基を有するトリプチセン誘導体 3 種 (Trip1、Trip2、Trip3) を対象に、バルク相、真空中の 1~4 層薄膜、SiO<sub>2</sub> 基板上単分子膜の条件で全原子 MD シミュレーションを行い、自己組織化構造、熱力学安定性、固体表面上での秩序化プロセスを調べました。その結果、これらのトリプチセン誘導体は、バルク相では隣接分子が逆向きの反平行配向が最安定ですが、単分子膜・二分子膜など超薄膜では平行配向が優先し、固体 (SiO<sub>2</sub>) 表面に形成された単分子膜においても平行配向が安定に維持されることが分かりました。さらに、熱アニーリング過程の MD シミュレーションにおいて、一部のトリプチセン分子が段差状三層膜から平坦二層膜へ再編成し、その中で分子が規則的に配列した領域が成長するという過程の可視化・定量化を実現しました。本成果は、最先端計測でも直接観察が難しい「界面での分子配向の選択」や「薄膜形成ダイナミクス」を全原子 MD シミュレーションにより分子レベルの描像として提示し、熱力学的に安定で高秩序な有機薄膜を設計するための指針を与えるものです。

今後、有機エレクトロニクス分野のキーマテリアルである有機分子、特に有機半導体分子が、固体表面のみならず物質循環を志向した高分子表面との界面で結晶薄膜を形成するプロセス、構造安定性を解析する上で本研究が提案した手法が大きな役割を果たすことが期待できます。

本成果は、3 月 26 日付で英国王立化学会の学術誌「*Nanoscale Horizons*」に掲載されました。

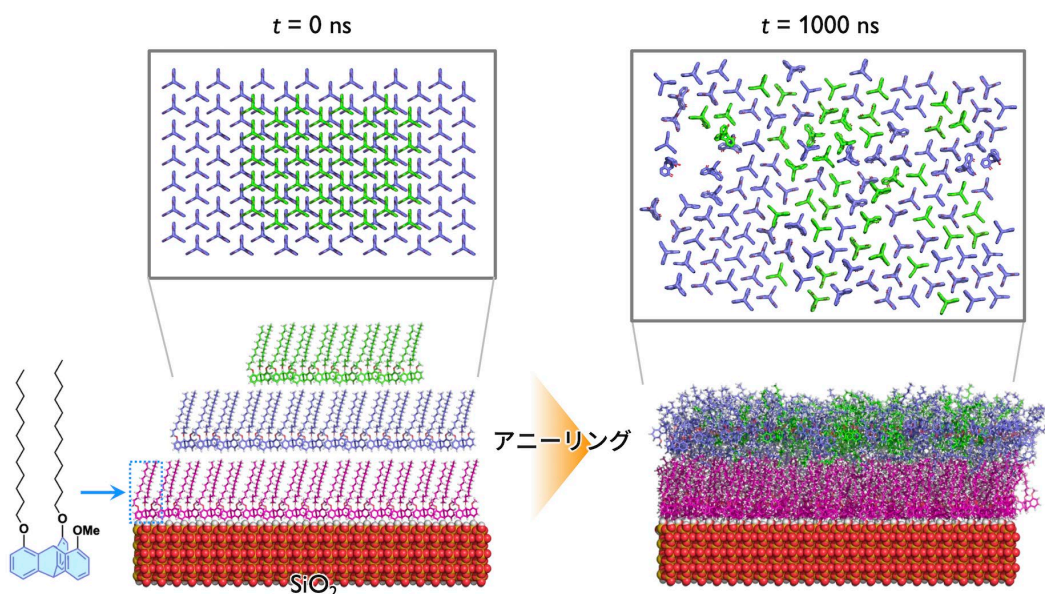


図 1. 本研究の概要図

## ■ 発表内容

### (1) 研究の背景

スマートフォンやフレキシブルディスプレイなど、私たちの身近な電子機器には、炭素を中心とした有機材料を用いた「有機薄膜トランジスタ (OTFT) <sup>※1</sup>」などのデバイスが使われています。これらのデバイスの性能を最大限に引き出すためには、固体表面上に形成される有機半導体分子が整然と並ぶ（配向する）ことが極めて重要です。特に、絶縁層と有機半導体層が接する「界面」の状態は、分子の並び方を決定づける大きな要因となります。従来、金属や酸化物の基板は「自己組織化<sup>※2</sup>単分子膜 (SAM)」によって表面を化学的に処理し、分子をきれいに並べる手法が一般的でした。しかし、プラスチック（ポリマー）のような有機材料でできた基板の上では、SAMを固定するための足場（アンカー部位）がないことが多く、分子を均一に並べるのは難しいという課題がありました。

この課題に対し、福島孝典教授らは、3枚の羽根を持つプロペラのような形状をしたトリプチセン<sup>※3</sup>という分子に、長いアルキル鎖を結合させた新しい誘導体（図2(a)に示した Trip1, Trip2, Trip3 など）を開発しました（アカウント論文として、*Acc. Chem. Res.* **2025**, *58*, 312）。このトリプチセン誘導体は、無機物・有機物を問わず様々な基板の上で、分子が自発的にハニカム（六角形）状に規則正しく並んだ2次元構造と、それが積み重なった1次元構造を持つ薄膜を形成するという性質を持っています（図2(b)）。実際に、この分子の薄膜を有機半導体の下地として使うと、その上に積層される半導体分子の並びが改善され、トランジスタの性能が向上することも実証されています。

しかし、なぜこの分子が基板の上でこれほどきれいに並ぶのか、その詳細なメカニズムは未解明のままでした。例えば、この分子の結晶（バルク<sup>※4</sup>相）では隣り合う分子同士が互い違い（反平行）に配向するのが最も安定ですが、基板上の薄膜では分子が同じ向き（平行）に揃って配向することが分かっています。固体表面と分子の間でどのような相互作用がはたらき、どのようにしてこの特殊な配向構造が生まれるのかは、最新の顕微鏡技術を用いても直接観察することが困難でした。そこで本研究では、スーパーコンピュータ等を用いた全原子分子動力学 (MD) シミュレーション<sup>※5</sup>を行い、分子一つ一つの動きを計算機の中で再現して、薄膜形成のプロセスや安定性をナノレベルで解明することを目指しました。

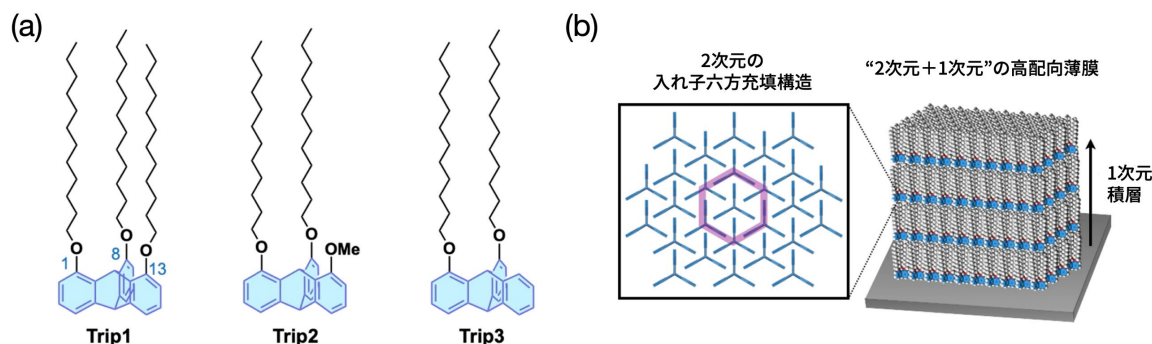


図 2. (a) 三脚型トリプチセン誘導体の分子構造と(b) これらの分子が形成する “2次元の入れ子六方充填+1次元積層”の高秩序薄膜の模式図

## (2) 研究の成果

- ・ 界面における「平行配向」の熱力学的安定性を実証

全原子 MD シミュレーションの結果、バルク状態では「反平行配向」が熱力学的に最安定である一方、単分子膜や二分子膜といった超薄膜の状態、および SiO<sub>2</sub> 基板上的の単分子膜においては「平行配向」が優先的に安定化することが明らかになりました (図 3)。これにより、固体表面との界面では、トリプチセン骨格の高密度充填、長鎖アルキルの流動性とパッキングの競合で分子の配向方向が決定されることが理解できました。

- ・ 薄膜形成ダイナミクスの可視化と定量化

熱アニーリング<sup>\*6</sup>過程の MD シミュレーションを行い、分子が自発的に組み変わって、秩序化していく様子の可視化に成功しました。特に、置換基の一つをメトキシ基に変えた誘導体 (Trip2) では、初期状態の段差状三層構造から、分子が再配置して平坦な二層構造へと変化し、その中で六方格子の秩序を持ったドメイン (領域) が時間とともに成長・拡大していく過程が確認されました (図 4)。

- ・ 分子構造の違いが膜の構造に与える影響を解明

Trip2 と側鎖のすべてが長鎖アルコキシ基である誘導体 (Trip1) との比較シミュレーションを行った結果、Trip1 ではアルキル鎖間の強いファンデルワールス力により初期のパッキング構造が維持されやすいのに対し、Trip2 ではメトキシ基の導入が分子間のパッキング様式を変化させ、再配置に必要なエネルギー障壁を下げる効果があることが判明しました。これにより、Trip2 において見られた「段差状構造」から「平坦な構造」への構造転移、および六方格子ドメインの成長が促進されるメカニズムを明らかにしました。本成果は、側鎖の化学構造を微調整することで、界面における分子配向のみならず、膜の層数や結晶性といった高次構造を精密に制御できる指針を提示するものです。

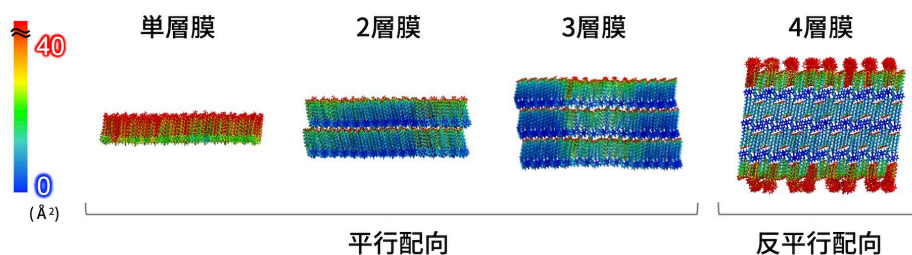


図 3. B-factor<sup>\*7</sup> でカラーマッピングした Trip1 の単層膜、2 層膜、3 層膜の平行配向構造と 4 層膜の反平行配向構造。カラーバーは各原子の B-factor 値に対応する。

## (4) 社会的意義

次世代有機エレクトロニクスデバイスの性能は、基盤となる有機薄膜の配向性・秩序性に直結します。本成果は、最先端計測でも直接観察が難しい「界面での分子の振る舞い」や「薄膜形成ダイナミクス」を、全原子 MD シミュレーションにより分子レベルの描像として提示し、熱力学的に安定で高秩序な有機薄膜を設計するための指針を与えるものです。

## (5) 今後の展開

今後、本研究で提案した手法は、有機エレクトロニクス分野のキーマテリアルである有機半導体分子などが、従来の固体表面だけでなく、物質循環を志向した高分子表面において、どのように結晶薄膜を形成し、構造を安定させるかを解析する上で重要な役割を担うと考えています。

さらに、本研究で得られた知見を基にして、未知の機能性分子の物性を事前に予測し、最適な分子構造を提案する「計算主導の未踏材料設計」が、物質循環型を含めた高性能な機能性有機薄膜創製やデバイス開発を加速することが期待されます。

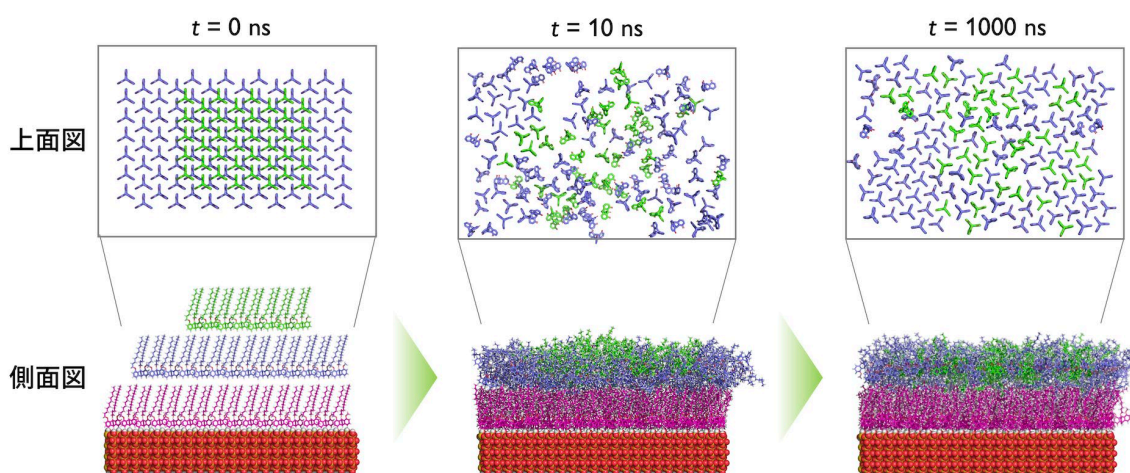


図 4. SiO<sub>2</sub> 基板上の Trip2 の段差状三層構造から平坦な二層構造への構造転移の様子。  
上面図では、上の二層についてトリプチセン骨格のみを表示。

## ■ その他

本研究は、科学技術振興機構（JST） 戦略的創造研究推進事業 CREST（課題番号：JPMJCR24S1、JPMJCR23O1）、日本学術振興会（JSPS）科学研究費補助金（JP22K18953、JP21H05024、JP21H04690、JP20H05868）の支援を受けて実施されました。また、「物質・デバイス領域共同研究拠点」における「人・環境と物質をつなぐイノベーション創出ダイナミック・アライアンス」の共同研究プログラムの助成を受けました。

## ■ 用語説明

### ※1 有機薄膜トランジスタ（OTFT）

スマートフォンやフレキシブルディスプレイなどの身近な電子機器に利用されている、炭素を中心とした有機材料を半導体層に用いたデバイス。

### ※2 自己組織化

分子が外部からの強制的な操作なしに、自発的に集まって規則正しい構造を形成する性質。

### ※3 トリプチセン

3枚の羽根を持つプロペラのような形状をした骨格を持つ分子。この特殊な形状により、基板上で特定の並び方（配向）をとりやすい性質を持っている。

### ※4 バルク

表面や界面の影響を無視できるほど十分に大きい、物質そのものの塊のこと。

### ※5 全原子分子動力学 (MD) シミュレーション

スーパーコンピュータなどを用いて、分子を構成する一つ一つの原子の動きを時間的に追跡し、その振る舞いを計算機の中で再現する計算化学の手法。分子間に働く力を物理法則に基づいて計算し、様々な温度や圧力などの条件を設定可能で、最新の実験装置でも直接観察が困難な、分子の集合構造やダイナミクスを可視化・解析することができる。

### ※6 熱アニーリング

材料を加熱した後ゆっくり冷却する処理のこと。このプロセスにより、分子が動きやすくなり再配置され、より熱力学的に安定な集合構造を形成する。

### ※7 B-factor

平衡状態において、原子が平均位置周りでどれだけ熱的揺動をしているかを表す物理パラメータ。温度因子、Debye-Waller 因子ともいわれ、X線結晶構造解析では結晶構造中の原子の熱振動などを表現するパラメータとして用いられている。

## ■ 発表内容

雑誌名: *Nanoscale Horizons*

題名 : Molecular Dynamics Insights into Orientation and Hexagonal Ordering of Tripodal Triptycenes on Solid Surfaces

著者名: Kaito Nitta, Yoshiaki Shoji, Takanori Fukushima, and Go Watanabe

DOI : [10.1039/d5nh00837a](https://doi.org/10.1039/d5nh00837a)

## ■ 問い合わせ先

### 【研究に関すること】

渡辺 豪 (わたなべ ごう)

北里大学未来工学部 教授

TEL: 042-778-8528

Email: [go0325@kitasato-u.ac.jp](mailto:go0325@kitasato-u.ac.jp)

**【JST 事業に関すること】**

安藤 裕輔 (あんどう ゆうすけ)

科学技術振興機構 戦略研究推進部 グリーンイノベーショングループ

TEL: 03-3512-3531

Email: crest@jst.go.jp

**【報道に関すること】**

北里研究所 総務部広報課

TEL: 03-5791-6422

Email: kohoh@kitasato-u.ac.jp

東京科学大学 総務企画部 広報課

TEL: 03-5734-2975

Email: media@adm.isct.ac.jp

科学技術振興機構 広報課

TEL: 03-5214-8404

Email: jstkoho@jst.go.jp