

課題名 (タイトル) :

有機半導体の構造物性相関

(Molecular packing and electronic property in organic semiconductor)

利用者氏名 : ○青山 哲也*, 横田 裕基*

所属 : 内山元素化学研究室*

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

有機エレクトロニクス発展に向けて、有機電界効果型トランジスタ (Organic Field-Effect Transistors: OFETs) が精力的に研究されている。有機材料のフロンティア軌道間相互作用と再配向エネルギーは、分子パッキングや分子構造によって決定されるものであり、OFETs の動作特性 (キャリア極性やキャリア移動度など) を決定する大切な因子である。このため、有機材料の構造と OFETs の動作特性の相関を明らかにすることは、有機エレクトロニクスの更なる発展に必要な不可欠である。

本課題では、ビスアゾメチン色素誘導体 (DE2、BSK25) やペンタセン、C₆₀ を用いた OFETs の動作特性に関して、Gaussian09 と ADF2010 を用いて量子化学計算を行い、構造物性相関を検討した。

2. 具体的な利用内容、計算方法

それぞれの材料の CIF データを元に、単結晶内で考えられうる 2 分子の組み合わせを全て取り出した。これらに対して、半経験的分子軌道法 (Gaussian09、ZINDO/S、STO-3G) と密度汎関数法 (ADF2010、PW91、TZP) を用いて一点エネルギー計算を行い、フロンティア軌道間相互作用を見積もった。また、DE2 に関しては、分子を 3 次元に拡張させた計算も行った。

3. 結果

2 分子間の計算から、DE2 単結晶内には HOMO 同士の相互作用と LUMO 同士の相互作用が同程度の大きさである ambipolar なキャリアの輸送経路が存在することが分かった。これらの相互作用は、代表的な p 型輸送材料であるペンタセン単結晶と代表的な n 型輸送材料である C₆₀ 単結晶内の軌道間相互作用に匹敵する大きさであった。DE2 単結晶の ambipolar 性は、3 次元拡張型の計算からも確認されており、配向を制御し

た時に観測される DE2-FET の ambipolar 輸送特性と良い相関を示した。また、DE2 と BSK25 の比較を行った結果、OFETs のキャリア輸送には相互作用の方向が重要であることが分かった。

4. まとめ

多様な有機材料と量子化学計算、FET 特性評価などを用いて、有機半導体材料の電荷輸送特性に関する知見を得た。

5. 今後の計画・展望

DE2 以外の材料に対し、3 次元拡張型の一点エネルギー計算と再配向エネルギー計算を行う。また、他の有機材料に関しても今回と同じ検討を行う予定である。

平成 25 年度 RICC 利用研究成果リスト

【国際会議、学会などでの口頭発表】

[1] Quantum chemical calculations and photoresponses in bisazomethine dye ambipolar thin film transistors, Tetsuya Aoyama, The 13th International Symposium on Advanced Organic Photonics (ISAOP-13), Kingston, Canada, September 2013, 招待講演

[2] ビスアゾメチン色素誘導体の配向制御とトランジスタ特性, ○横田裕基, Byung-Soon Kim, 石塚亜弥, 佐藤未英, Jean-Charles Ribierre, 田中利彦, 村中厚哉, 内山真伸, 松本真哉, 青山哲也, 第 74 回応用物理学会秋季学術講演会, 同志社大学, 2013 年 9 月, 口頭発表.

[3] 有機トランジスタにおける ambipolar 輸送特性の量子化学計算による検討, ○青山哲也, 横田裕基, 村中厚哉, 石塚亜弥, 田中利彦, 橋爪大輔, 武藤豪志, 高石和人, 内山真伸, J. C. Ribierre, 松本真哉, 第 74 回応用物理学会秋季学術講演会, 同志社大学, 2013 年 9 月, 口頭発表.

[4] ビスアゾメチン色素薄膜を用いたトランジスタにおける分子配向の制御と輸送特性の相関, 横田裕基, Byung-Soon Kim, 橋爪大輔, Jean-Charles Ribierre, 田中利彦, 村中厚哉, 内山真伸, 松本真哉, ○青山哲也, 第 61 回応用物理学会春季学術講演会, 青山学院大学, 2014 年 3 月, 口頭発表予定.

【その他】

[5] Control of Molecular Alignment and Transport Properties of Bisazomethine Dye Thin-Film Transistors, ○Yuki Yokota, Byung-Soon Kim, Aya Ishizuka, Mie Sato, Jean-Charles Ribierre, Toshihiko Tanaka, Atsuya Muranaka, Masanobu Uchiyama, Shinya Matsumoto, Tetsuya Aoyama, International Conference on Frontiers of Polymers and Advanced Materials(ICFPAM2013), Auckland, New Zealand, December 2013, ポスター発表.

[6] Analysis by quantum chemical calculations on ambipolar organic thin film transistors, ○Tetsuya Aoyama, Yuki Yokota, Atsuya Muranaka, Aya Ishizuka, Toshihiko Tanaka, Daisuke Hashizume, Tsuyoshi Muto, Kazuto Takaishi, Masanobu Uchiyama, Shinya Matsumoto, Jean-Charles Ribierre, International Conference on Frontiers of Polymers and Advanced Materials(ICFPAM2013), Auckland, New Zealand, December 2013, ポスター発表.