

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\*, 松鷹 宏\*\*

所属 : 内山元素化学研究室\*, 光電子デバイス工学研究チーム\*\*

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的发展に向けて、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)、オリゴフルオレン、チエノキノイド誘導体 (QQT(CN)4) のエネルギー準位や分子間相互作用を Gaussian09 を用いて求め、構造物性相関を検討した。

2. 具体的な利用内容、計算方法

フルオレン・ユニットの数異なるオリゴフルオレンについて、それぞれ構造最適化を行い、HOMO および LUMO を求めた。ユニット数とエネルギー準位の関係について検討した。

QQT(CN)4 について、計算する分子群の違いに応じたエネルギー準位の分裂の変化を検討した。

3. 結果

オリゴフルオレンでは、ユニット数の逆数に比例して、HOMO および LUMO が変化することが確認された。この結果は、溶液やフィルムでの実験結果に一致した。

QQT(CN)4 の針状結晶では、結晶の長軸方向に、強い分子間相互作用があることが分かった。この方向では、エネルギー準位の分裂が  $\cos(\pi/(N+1))$  に比例して増大し、tight-binding theory に則っていることが分かった。また、HOMO と LUMO の分裂幅は同程度であり、ambipolar 型の電荷輸送特性を有していることが分か

った。これは、実際のトランジスタにおける実験結果に一致した。

4. まとめ

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

有機半導体材料で再配向エネルギー計算を行い、電荷輸送特性との相関について検討する。また、発光材料のエネルギー準位を求めていく予定である。

平成 26 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

[1] E. Y. Choi, L. Mazur, L. Mager, M. Gwon, D. Pitrat, J. C. Mulatier, C. Monnereau, A. Fort, A. J. Attias, K. Dorkenoo, J. E. Kwon, Y. Xiao, K. Matczyszyn, M. Samoc, D.-W. Kim, A. Nakao, B. Heinrich, D. Hashizume, M. Uchiyama, S. Y. Park, F. Mathevet, T. Aoyama, C. Andraud, J. W. Wu, A. Barsella, and J. C. Ribierre, “Photophysical, amplified spontaneous emission and charge transport properties of oligofluorene derivatives in thin films”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **vol. 16**, 16941–16956 (2014).

[2] J. C. Ribierre, Y. Yokota, M. Sato, A. Ishizuka, T. Tanaka, S. Watanabe, M. Matsumoto, A. Muranaka, S. Matsumoto\*, M. Uchiyama, and T. Aoyama, “Influence of the grain orientation on the charge transport properties of organic field-effect transistors”, *RSC Adv.*, **vol. 4**, 36729–36737 (2014).

【国際会議、学会などでの口頭発表】

[3] T. Aoyama, Y. Yokota, B.-S. Kim, T. Tanaka, D. Hashizume, A. Muranaka, M. Uchiyama, J.-C. Ribierre, and S. Matsumoto, “Analysis of molecular packing and carrier transport in bisazomethine dye derivatives by X-ray diffraction and quantum chemical calculations”, 22nd International Conference for Science and Technology of Synthetic Metals (ICSM 2014), Turku, Finland, July 2014.

[4] T. Aoyama, “Control of molecular packing and grain orientation for organic optoelectronic devices”, The 14th International Symposium on Advanced Organic Photonics (ISAOP-14), Osaka, Japan, Nov. 2014. (招待講演)

[5] 青山哲也, “有機半導体材料における分子パッキング制御と光電子デバイスへの応用”, 理研シンポジウム「有機エレクトロニクスの実用化に向けた次世代製造技術」, 和光, 2014年12月