

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

Analysis by quantum chemical calculations on ambipolar carrier transport
in organic thin film transistors

理研¹, 横国大², 福島高専³, 九大⁴

○青山哲也¹, 横田裕基^{1,2}, 村中厚哉¹, 石塚亜弥^{1,2}, 田中利彦³, 橋爪大輔¹, 武藤豪志¹,
高石和人¹, 内山真伸¹, J. C. Ribierre⁴, 松本真哉^{1,2}

RIKEN¹, Yokohama Nat. Univ.², Fukushima Nat. College Tech.³, Kyushu Univ.⁴

○Tetsuya Aoyama¹, Yuki Yokota^{1,2}, Atsuya Muranaka¹, Aya Ishizuka^{1,2}, Toshihiko Tanaka³, Daisuke Hashizume¹,
Tsuyoshi Muto¹, Kazuto Takaishi¹, Masanobu Uchiyama¹, Jean-Charles Ribierre⁴, Shinya Matsumoto^{1,2}

E-mail: taoyama@riken.jp

【はじめに】我々は有機トランジスタにおいて、分子配列構造と電荷輸送特性の相関性について研究を行っている。これまでに、チエノキノイド誘導体 QQT(CN)4 (Fig.1)に加熱処理などを行うと、分子配列構造の変化を伴って p 型/n 型の電荷輸送特性が変換されることや、ビスアゾメチン色素のジエチルアミノ誘導体 DE2(Fig.1)を Polytetrafluoroethylene (PTFE)ラビング膜の利用により配向させると、ホール移動度が二桁程度増大することを示してきた。どちらの分子においても、特定の分子配列構造の場合に ambipolar 輸送特性が確認されている。今回、量子化学計算を用いて、分子が本質的に有している輸送特性について検討したので報告する。

【実験】トランジスタは熱酸化膜付き Si 基板と金電極により、ボトムゲート・トップコンタクト型の素子構造で作製した。DE2 の場合は、チャンネル方向にラビングした PTFE 膜を熱酸化膜上に作製し、その上に DE2 の真空蒸着膜を作製した。QQT(CN)4 の場合は、熱酸化膜上にスピンコート膜を作製した。量子化学計算では、結晶の構造データ(CIF)と半経験的分子軌道法(ZINDO/S)を用いて、複数分子間の HOMO および LUMO の splitting を見積もった。

【結果】DE2、QQT(CN)4 の両者とも、ホール輸送が優勢な ambipolar 輸送特性を示した。量子化学計算では、それぞれのフロンティア軌道が広く重なり合った 2 分子間において splitting が大きくなった。大きな splitting を示す分子間が、電荷の主たるパスと考えられ、そこでの値は、HOMO の場合と LUMO の場合とで類似するものであった(Table 1)。このことは、DE2 および QQT(CN)4 が、本質的に ambipolar 輸送特性を示す材料であることを表している。さらに、数個以上の複数分子間で計算を行った場合においては、HOMO と LUMO の splitting がより近い値であった。

【謝辞】本研究の一部は日本学術振興会科学研究費補助金、基盤研究(B)の助成を受けて実施した。

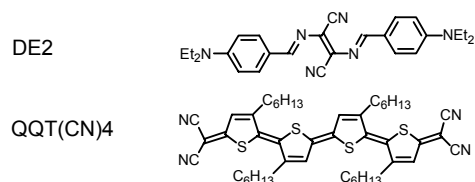


Fig.1 The chemical structures of DE2 and QQT(CN)4.

Table 1 The electronic splittings of the HOMO and LUMO levels in dimers made of two DE2 and two QQT(CN)4.

	$\Delta\text{HOMO} / \text{meV}$	$\Delta\text{LUMO} / \text{meV}$
DE2	143	82
QQT(CN)4	302	196