

ジナフトチエノチオフェン骨格を有する n 型有機トランジスタ材料の設計

Design of n-type organic transistor materials having a dinaphthothienothiophene frame

神戸大院工¹, 東大ナノ量子機構²°見塚 翔太¹, 北村 雅季^{1,2}Kobe Univ.¹ and NanoQuine, Univ. Tokyo²°Shota Mizuka¹ and Masatoshi Kitamura^{1,2}

E-mail:149t259t@stu.kobe-u.ac.jp

有機トランジスタ材料にはペンタセンに代表されるように様々なものが存在する。最近では、dinaphthothienothiophene (DNNT)[1]や高移動度を示す alkylated-DNNT[2]が報告されている。これらは p 型半導体として機能する。高移動度の n 型材料としては C₆₀[3]や perylene 誘導体[4]が知られているが、仮に DNNT 骨格を有する n 型有機半導体の実現できれば、これらを超える特性が得られる可能性がある。本研究では、n 型有機半導体材料となり得る DNNT 骨格を有する材料を設計し、量子化学計算により評価を行ったのでそれについて報告する。

高移動度の n 型材料を実現するためには(1)有機材料と電極との間で電子に対するエネルギー障壁が小さく、(2)有機分子間での電子移動が可能なが求められる。前者については、有機半導体材料の LUMO 準位を下げるにより実現できる。通常、有機材料の骨格に電子吸引基を導入すると LUMO 準位を下げるができる。我々は DNNT を骨格とし、図 1 の 3~7 のような電子吸引基を導入した材料に対して量子化学計算を行った。また、C₈-DNNT および DNNT についても計算を行った。計算には Gaussian09 を使用し、最適構造を PM6 により求めた後に、B3LYP/LanL2DZ レベルでエネルギー計算を行った。

図 2 に HOMO エネルギーと LUMO エネルギーの計算結果を示す。図の順に LUMO エネルギーが低くなっており、3~7 の分子では DNNT より LUMO エネルギーが低く、電子吸引基導入の効果が現れている。特に 6 のカルボニル基や 7 のシアノ基の導入により LUMO エネルギーが大きく下がることが分かる。他方、再配置エネルギーを計算したところ、3 で最も小さく 0.212 eV の値が得られた。3 は LUMO エネルギーがやや高いものの、再配置エネルギーから考えると今回検討した材料の中では最も高い電子移動度が期待できる。

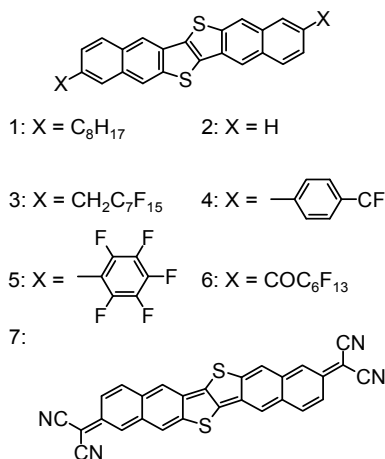


Fig.1. Chemical structure of DNNT derivatives.

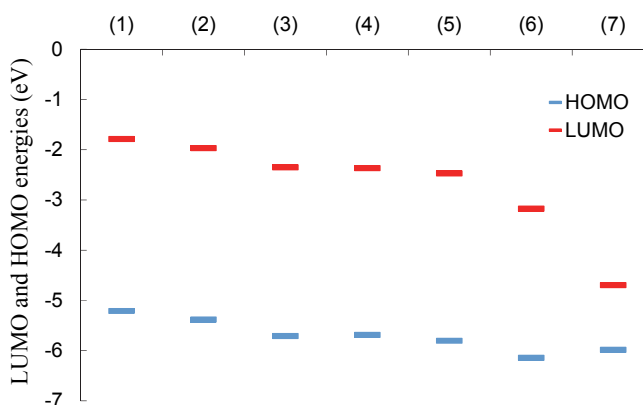


Fig.2. LUMO and HOMO energy levels for DNNT derivatives.

[謝辞]本研究は文部科学省イノベーションシステム整備事業および科研費基盤研究(C) (24550211)の支援により遂行された。

[参考文献] [1] T. Yamamoto, K. Takimiya, *J. Am. Chem. Soc.* **129** 2224 (2007). [2] M. J. Kang, *et al.*, *Adv. Mater.* **23** 1222 (2011). [3] R. Schmidt, *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **131** 6215 (2009). [4] T. D. Anthopoulos, *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **89** 213504 (2006).