

フタロシアニン誘導体に保護された π 接合 Au ナノ粒子の電子構造

Electronic Structure of Phthalocyanine Derivative-protected π -junction Au Nanoparticles

東理大¹, 岡山大² ◦安部裕一¹, 金原正幸², 金井要¹

Tokyo Univ. of Science¹, Okayama Univ.², ◦Yuichi Abe¹, Masayuki Kanehara², Kaname Kanai¹

E-mail: j6213601@ed.tus.ac.jp

有機薄膜太陽電池、有機 LED 等の有機半導体デバイスは、簡便な塗布プロセスによって作製できるというメリットを持つ。最近、これらのデバイスの電極材料として、やはり塗布プロセスが使える金属ナノ粒子が注目されている。従来の金属ナノ粒子電極は、塗布後に加熱処理が必要であり、それに伴う劣化が問題となっている。そこで、最近、加熱処理なしで高い導電性を発現する常温導電性金ナノ粒子が開発された^[1]。この金ナノ粒子(AuNPs)を有機電界効果トランジスタ(OFET)のソース-ドレイン電極として用いることで、電極が真空蒸着された OFET に匹敵する移動度を示すことが報告されている^[1]。この AuNPs は表面をフタロシアニン(Pc)誘導体によって保護されており、配位した Pc 誘導体が導電性の発現に何らかの役割を担っていると考えられているが、詳細は明らかとなっていない。そこで本研究ではこの AuNPs の電気伝導の機構を解明するために、Pc 誘導体 OTAP (2,3,9,10,16,17,23,24-octakis[2-(dimethylamino)ethylthio]phthalocyanine)、OTAN (2,3,11,12,20,21,29,30-octakis[2-(dimethylamino)ethylthio]naphthalocyanine) および、これらの配位子によってそれぞれ保護された AuNPs(OTAP-,OTAN-AuNPs)の電子構造を光電子分光によって明らかにする。

図 2 に OTAP、OTAN 薄膜の UPS/IPES スペクトルを示す。Pc 骨格を有する OTAP に比べ、ナフタロシアニン骨格を有する OTAN は π 共役系が拡張しているため、HOMO が高く、HOMO-LUMO ギャップ(E_g)も OTAP の 2.1 eV に比べ OTAN は 1.0 eV と劇的に小さいことが明らかになった。さらに OTAP-,OTAN-AuNPs の電気伝導度はそれぞれ 1560, 6600 Scm⁻¹ と報告されており^[1]、OTAN-AuNPs は高い電気伝導度を示す。このことから OTAP-, OTAN-AuNPs 薄膜の電気伝導度と配位子の電子構造との間に相関があることが示唆される。発表では、OTAP、OTAN 薄膜および OTAP-, OTAN-AuNPs 薄膜の XPS の結果を示し、より詳細に論ずる予定である。

[1] M. Kanehara, *et al.*, Bull. Chem. Soc. Jpn. **85** 957961 (2012)

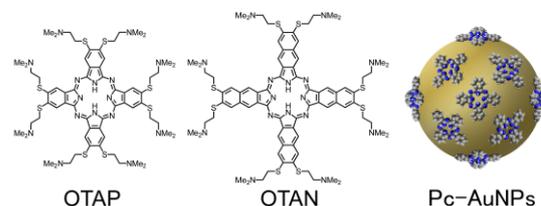


図 1. OTAP,OTAN の分子構造、Pc によって保護された AuNPs の模式図

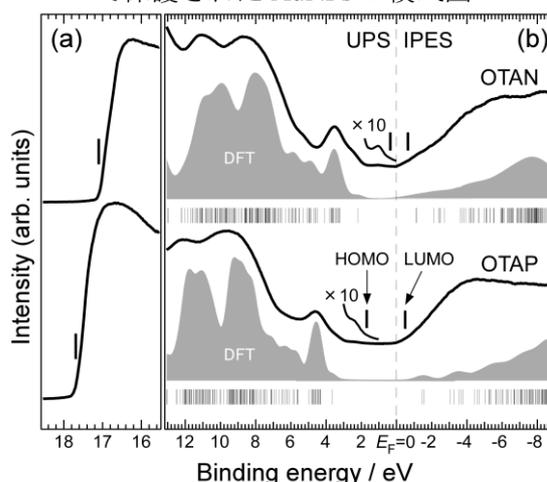


図 2. UPS/IPES スペクトル。(a)カットオフ、(b)フェルミ準位付近のスペクトル。スペクトルの下の縦線は分子軌道計算結果。