

チエノキノイド針状結晶における ambipolar 型電荷輸送特性： トランジスタ特性と量子化学計算による検討

Ambipolar carrier transport in single crystal microwires of thienoquinoid derivative:

Transistor characteristics and quantum chemical calculations

理研¹, 理研 CEMS², 横国大³, 東大院薬⁴, 九大⁵

○青山哲也¹, 村中厚哉¹, 喜々津智都², 井ノ上大嗣², 橋爪大輔², 松本真哉^{1,3}, 武藤豪志¹,
高石和人¹, 内山真伸^{1,4}, P. André¹, L. Zhao⁵, 古川晴一⁵, 安達千波矢⁵, J. C. Ribierre⁵

RIKEN¹, RIKEN CEMS², Yokohama Nat. Univ.³, Univ. of Tokyo⁴, Kyushu Univ.⁵

○Tetsuya Aoyama¹, Atsuya Muranaka¹, Tomoka Kikitsu², Daishi Inoue², Daisuke Hashizume²,

Shinya Matsumoto^{1,3}, Tsuyoshi Muto¹, Kazuto Takaishi¹, Masanobu Uchiyama^{1,4}, Pascal André¹, Li Zhao⁵,

Seiichi Furukawa⁵, Chihaya Adachi⁵, Jean-Charles Ribierre⁵

E-mail: taoyama@riken.jp

【はじめに】我々は有機トランジスタにおいて、分子パッキング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, inset)において、p 型/n 型の電荷輸送特性の変換や、非常にフレキシブルなデュアルモード有機強誘電体メモリーを報告してきた^[1]。今回、QQT(CN)4 では、シンプルな溶液プロセスで針状の単結晶が得られ、そのトランジスタは高移動度な ambipolar 輸送特性を示すことが分かり^[2]、また単結晶中の電荷輸送について量子化学計算を用いて検討したので報告する。

【実験】クロロホルム蒸気下で QQT(CN)4 のクロロホルム溶液をキャストすると、長さ 100 μm 程度の針状結晶の集合体を得られた。これをヘキサンに分散し、熱酸化膜付き Si 基板にキャストした。金電極を蒸着し、ボトムゲート・トップコンタクト型のトランジスタを作製した。X 線回折および電子線回折により、針状結晶中の分子パッキングを決定した。量子化学計算では、半経験的分子軌道法(ZINDO/S)により、複数分子間の HOMO および LUMO の splitting を見積もった。

【結果】針状結晶トランジスタの移動度はホールと電子でそれぞれ 0.4, 0.5 cm^2/Vs に到達し、溶液プロセスの ambipolar な針状結晶では極めて高移動度であった。量子化学計算では、分子数の増大に伴って HOMO と LUMO の splitting が飽和し(Fig.1)、それぞれの値は 0.60 および 0.41eV となり、針状結晶が長軸方向に ambipolar 型輸送特性を本質的に有することが示された。

【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。量子化学計算は、RIKEN Integrated Cluster of Clusters (RICC) を用いて実行された。

[1] *Adv. Mater.*, **22**, 1722 (2010); *Nature Commun.*, **5**, 3583 (2014).

[2] *Chem. Commun.*, **51**, 5836 (2015).

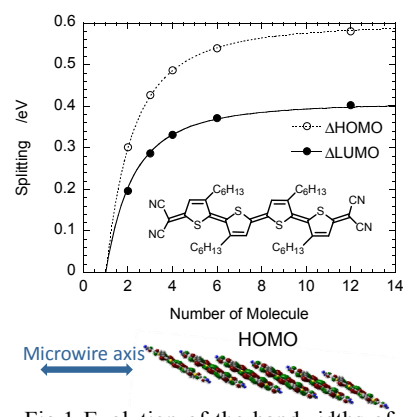


Fig.1 Evolution of the bandwidths of the HOMO and LUMO energy levels of QQT(CN)4 molecules (inset) stacked along the long axis of the single crystal microwires.