ビスアゾメチン色素単結晶トランジスタにおける分子パッキング構造と電荷輸送特性の解析

Analysis of Molecular Packing and Carrier Transport Properties in Bisazomethine Dye Single Crystal Transistors

理研 [1], 横国大院環情 [2], 理研 CEMS[3], 九大 OPERA[4], 福島高専 [5], 東大院薬 [6]
○青山哲也 [1], 上原拓也 [1,2], 横田裕基 [1,2], Byung-Soon Kim[2], 橋爪大輔 [3],
Jean-Charles Ribierre[4], 田中利彦 [5], 村中厚哉 [1], 内山真伸 [1,6], 松本真哉 [1,2]
RIKEN[1], Yokohama Nat. Univ.[2], RIKEN CEMS[3], Kyushu Univ.[4],
Nat. Inst. Tech., Fukushima College[5], Univ. of Tokyo[6]
°Tetsuya Aoyama[1], Takuya Uehara[1,2], Yuki Yokota[1,2], Byung-Soon Kim[2], Daisuke Hashizume[3],
Jean-Charles Ribierre[4], Toshihiko Tanaka[5], Atsuya Muranaka[1], Masanobu Uchiyama[1,6], Shinya Matsumoto[1,2]
E-mail : taoyama@riken.jp

【はじめに】有機分子の配列は有機電界効果型トランジスタ (有機 FET)の特性に大きく影響する。これまでに、ビスアゾメチン色素誘導体 (DE2、Fig.1a)真空蒸着膜の分子配列を制御し、FET のホール移動度の二桁向上や異方性付与を実施するとともに、量子化学計算や X 線回折法を活用して電荷移動経路について検討してきた[1]。今回、DE2 色素分子の単結晶を作製し、単結晶 FET の電荷輸送特性、結晶中の分子パッキングおよび電荷移動経路を明らかにしたので報告する。

【実験】気液拡散法により、針状の DE2 単結晶を得た。ボトムコンタクト型の DE2 単結晶 FET を作製し、電荷輸送特性を評価した。X 線構造解析により決定した結晶構造を元に、FET と同時作製した針状結晶の面指数を求め、結晶方位を決定した。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 のエネルギー分裂幅を見積もり、電荷移動経路を検討した。

【結果】X 線構造解析および偏光顕微鏡観察(Fig.1b)により、分子長軸方向より約 26 度傾いた方向に結晶成長していることが分かった(Fig.1c)。また、エネルギー分裂幅の大きい分子間の配列、すなわち電荷輸送経路が、結晶長軸にほぼ平行であることが分かった。従って、その方向に伝導チャネルを形成させる単結晶 FET が、上記解析上、最も高い移動度が得られる構造である。本実験の FET は上記構造で作製しており、このことが DE2 で最高のホール移動度(1.1×10^{-2} cm^2 V^{-1} s^{-1})が得られたことの一因と考えられる。

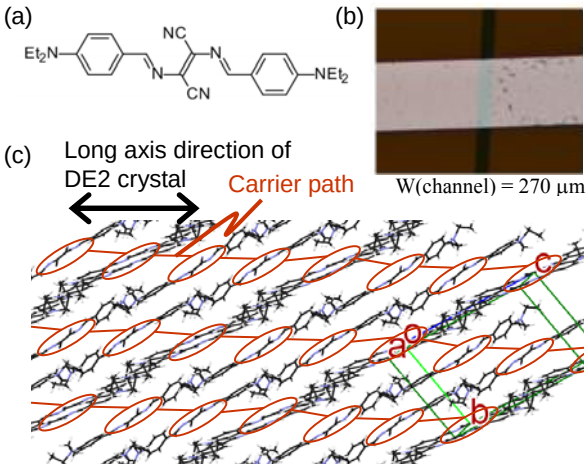

Fig.1 (a) The chemical structure of DE2. (b) A polarized optical microscope image of a DE2 crystal-FET. (c) A representation of the molecular packing and the carrier path in the DE2 crystal.

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

[1] *RSC Adv.*, **4**, 367297 (2014).