

Non-peripheral 型オクタヘキシルフタロシアニン銅錯体の 両極性キャリア輸送に関する考察

Ambipolar Carrier Transport of

Non-peripherally Octahexyl-substituted Copper Phthalocyanine

渡辺 健, 渡辺 光一, 藤内 謙光, [○]藤井 彰彦, 尾崎 雅則 (阪大院工)

Ken Watanabe, Koichi Watanabe, Norimitsu Tohnai, [○]Akihiko Fujii, Masanori Ozaki (Osaka Univ.)

E-mail: afujii@opal.eei.eng.osaka-u.ac.jp

1. 緒言 可溶性有機半導体であるフタロシアニン誘導体 C6PcH₂ は室温において正孔移動度 1.1 cm²/Vs、電子移動度 0.9 cm²/Vs を示す^[1]。一方、銅錯体である C6PcCu は室温において正孔移動度 0.6 cm²/Vs、電子移動度 0.9 cm²/Vs を示す。中心金属の種類により支配的なキャリアの極性及びその温度依存性が異なるが、その原因については明らかになっていない。本研究では X 線構造解析により得られた C6PcCu の分子パッキング構造に対し、密度汎関数(DFT)法を用いた電子カップリングの計算を行い、キャリア輸送特性の考察を行った。

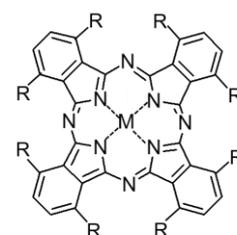
2. 実験 2枚の透明電極(ITO)つきガラス基板で構成されるサンドイッチセルを用いて TOF 法によるキャリア移動度測定を行った。また C6PcCu の単結晶構造解析を行い、隣接分子間の回転角および格子定数の温度依存性を調べた。得られた C6PcCu の単結晶構造に基づき、2 分子ペアに対する DFT 計算(GGA:PW91/TZP)を行い、電子カップリングを算出した。

3. 結果 図 2 に TOF 法により得られた C6PcCu の正孔移動度および電子移動度の温度依存性を示す。X 線構造解析が可能な低温領域においても、電子・正孔ともに緩やかな正の温度依存性を示し、C6PcH₂ のような無金属の場合と異なり電子が支配的なキャリアであることがわかった^[2]。図 3 に X 線構造解析の結果を示す。C6PcH₂ は分子の面内軸がすべて同一方向となるのに対し、C6PcCu は隣接分子間で面内に回転角を持つことがわかった。DFT 計算により電子カップリングの回転角依存性を明らかにし、支配的なキャリアの極性或温度依存性について考察した。

4. 謝辞 DFT 計算に関して御助言を頂戴いたしました産業技術総合研究所 米谷慎博士に感謝の意と御礼の言葉を申し上げます。本研究の一部は JST 先端的低炭素技術開発(ALCA)、科学研究費補助金 15H03552、及び研究拠点形成事業(A. 先端拠点形成型)の援助のもと行われました。

参考文献

[1] Y. Miyake *et al.*, *Appl. Phys. Express*, **4** 021604 (2011). [2] K. Watanabe *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.*, in press.



C₆PcH₂: M=H₂, R=C₆H₁₃
C₆PcCu: M=Cu, R=C₆H₁₃

Fig. 1 Molecular structure of C6PcH₂ and C6PcCu

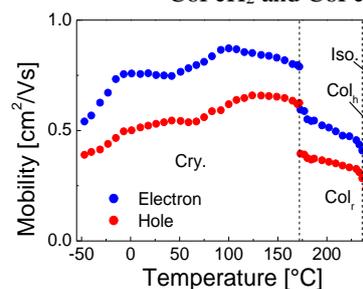


Fig. 2 Temperature dependence of carrier mobility of C6PcCu

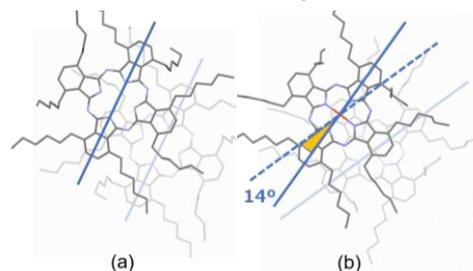


Fig. 3 Dimer structure in (a)C6PcH₂ and (b)C6PcCu single crystal