電荷移動錯体を用いた有機トランジスタ

Organic Transistors Using Charge-Transfer Complexes

°佐藤 諒之介¹、劉 東昊¹、東野 寿樹²、角屋 智史³、川本 正¹、森 健彦¹

(1. 東工大物質理工学院、2. 産総研 FLEC、3. 兵庫県立大物質理)

°Ryonosuke Sato¹, Dongho Yoo¹, Toshiki Higashino², Tomofumi Kadoya³, Tadashi Kawamoto¹, Takehiko Mori¹

(1. Tokyo Tech., 2. AIST, 3. Univ. of Hyogo)

E-mail: sato.r.ah@m.titech.ac.jp

我々は、ドナー分子とアクセプター分子が交互に積層した交互積層型電荷移動錯体のトランジスタ特性を報告してきた[1–6]。(BTBT)(TCNQ) (Fig. 1) のトランジスタが長期間大気安定な n 型特性を示したのに対し[3]、(4T)(TCNQ) (Fig. 1) のトランジスタは正孔優勢のアンバイポーラ型特性を示した[5]。TCNQ LUMO 軌道と BTBT HOMO 軌道との間のトランスファー積分は、BTBT HOMO–1 軌道との間のトランスファー積分に比べて極めて小さい。しかし、TCNQ LUMO 軌道と 4T HOMO 軌道との間のトランスファー積分は、4T HOMO–1 軌道との間のトランスファー積分と同程度である。TCNQ LUMO、BTBT HOMO–1、4T HOMO、4T HOMO–1 の各軌道は縦縞状の対称性をもつが、BTBT HOMO 軌道はそれに直交する対称性をもつため (Fig. 1)、TCNQ LUMO–BTBT HOMO 間のトランスファー積分が小さくなったものと考えられる。よって、交互積層型電荷移動錯体のキャリア極性はドナー分子とアクセプター分子のフロンティア軌道の対称性によって決まると考えられる[5]。この考察をもとにして、(Perylene)(CyHex-PDI)と(BrNH)(BrNQ) (Fig. 1) のトランジスタを作製した。Perylene の HOMO、LUMO 軌道は CyHex-PDI の HOMO、LUMO 軌道とそれぞれ同じ形で、BrNH の HOMO 軌道は BrNQ の LUMO 軌道と同じ形であるため (Fig. 1)、これらの錯体はアンバイポーラ型特性を示すと予想される。実際に(Perylene)(CyHex-PDI)はアンバイポーラ型特性を示したが、(BrNH)(BrNQ)は n 型特性のみを示した。BrNH HOMO 軌道が BrNQ の LUMO 以外の軌道と混成した結果、LUMO の寄与をキャンセルしたことが原因と考えられる[6]。

Figure 1 Molecular orbitals of donors and acceptors.

[1] C. Fujisue *et al.*, *RSC Adv.* **2016**, *6*, 53345. [2] T. Higashino *et al.*, *J. Mater. Chem. C* **2016**, *4*, 5981. [3] R. Sato *et al.*, *J. Phys. Chem. C* **2017**, *121*, 6561. [4] K. Iijima *et al.*, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2018**, *10*, 10262. [5] R. Sato *et al.*, *J. Mater. Chem. C*, DOI: 10.1039/c8tc05190a. [6] R. Sato *et al.*, *Chem. Lett.*, *accepted*.