

DFT 計算を用いたテトラベンゾトリアザポルフィリン誘導体の 電荷輸送シミュレーション

Carrier transport simulation of tetrabenzotriazaporphyrin derivative by using DFT calculation

阪大院工¹, 産総研² ○藤崎 雅隆¹, 中野 知佳¹, 米谷 慎², 藤内 謙光¹, 藤井 彰彦¹, 尾崎 雅則¹
Osaka Univ.¹, AIST², °Masataka Fujisaki¹, Chika Nakano¹, Makoto Yoneya², Norimitsu Tohnai¹,
Akihiko Fujii¹, Masanori Ozaki¹

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

【緒言】有機半導体材料におけるキャリア輸送特性は、隣接分子間の π 電子軌道の重なりに強く依存することが知られている。図 1 に示すテトラベンゾトリアザポルフィリン誘導体 C6TBTAPH₂ は、自己組織的にカラム構造を形成し、カラム軸方向のキャリア移動度は正の温度依存性を示すが^[1]、その要因は未だ不明である。類縁体で Cu 錯体の C6PcCu も同様の正の温度依存性を示すが、Cu の配位に伴う分子面の回転を考慮した量子化学計算により説明された^[2]。本研究では、C6TBTAPH₂ の回転角に着目し、密度汎関数理論 (DFT) による電荷輸送シミュレーションを行い、キャリア移動度について議論した。

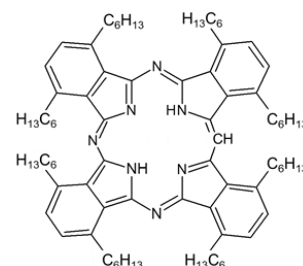


Fig. 1 Molecular structure of C6TBTAPH₂

【実験】C6TBTAPH₂ の単結晶構造解析によると、図 2 に示すように隣接分子間で 163° 回転した分子パッキング構造^[3]となっていることから、この分子パッキング構造を基準として、回転角 $\theta = 158^\circ \sim 168^\circ$ を有する二量体について、DFT 計算 (GGA:PW91/TZP) を行い、キャリア移動度の算出を行った。

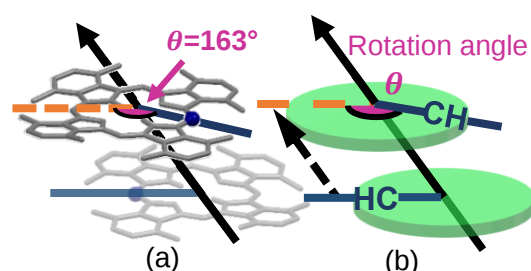


Fig. 2 (a) Molecular packing structure and (b) schematic diagram of the rotation angle θ in C6TBTAPH₂ molecular plane.

【結果と考察】図 3 に示すように、C6TBTAPH₂ のキャリア移動度は面内回転角に依存し、電子移動度が回転角に対し単調減少するのに対し、正孔移動度は 167° で極小値となった。これは、分子の回転により、2 分子間の π 電子軌道の重なりが変化したためと考えられる。163° 付近では回転角の減少に伴っていずれの移動度も増大することから、温度の上昇に伴う移動度の向上は回転角の変化に伴うことが示唆された。詳細は当日発表する。

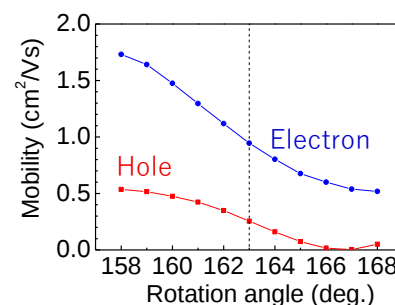


Fig. 3 Rotation angle dependence of carrier mobility for C6TBTAPH₂

【謝辞】本研究の一部は科学研究費補助金 (18H04514) および JSPS 研究拠点形成事業 (A. 先端拠点形成型) の援助の下に行われた。

[1] Q. D. Dao *et al.*, *Chem. Lett.*, **43**, 1761 (2014). [2] K. Watanabe *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **57**, 04FL01 (2018). [3] C. Nakano *et al.*, *J. Cryst. Growth*, **468**, 810 (2017).