

Non-peripheral 型オクタブチル置換フタロシアニンの キャリア伝導特性とバーコート配向薄膜の作製

Carrier Transport Properties and Bar-coated Thin Film Fabrication of Non-peripheral Butyl-substituted Phthalocyanine

阪大院工, °西本 江里, 正能 拓馬, 鞆野 弦也, 藪内 湧太, 藤井 彰彦, 尾崎 雅則

Osaka Univ., °Eri Nishimoto, Takuma Shono, Genya Uzurano, Yuta Yabuuchi,

Akihiko Fujii, Masanori Ozaki

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

【緒言】アルキル基を導入したフタロシアニン誘導体はカラムナー構造を自己組織的に形成し、溶液プロセスで製膜可能な有機半導体材料である。Non-peripheral 位にヘキシル基を有するフタロシアニン誘導体 (C6PcH₂) は高いキャリア移動度を示すが^[1]、ヘキシル基より短いアルキル基を置換基として選択した場合、分子間距離の短縮に伴う電気特性の向上が期待される。そこで本研究では、図 1 に示すブチル基を有するフタロシアニン誘導体 (C4PcH₂) に着目し、その分子パッキング構造に基づくキャリア移動度シミュレーションを行うとともに、配向薄膜の作製と電界効果移動度の計測を試みた。

【実験】C4PcH₂ の単結晶を作製し、X線構造解析を行った。決定された分子パッキング構造の隣接二量体間について DFT 計算 (GGA:PW91/TZP) を行い、キャリア移動度を算出した。クロロベンゼンを溶媒とする 5 g/L の C4PcH₂ 溶液を調製し、基板温度 80°C、掃引速度 30 μm/s として、バーコート法^[2]により C4PcH₂ 薄膜を作製した。X線回折法により薄膜中の結晶構造を調べるとともに、MOSFET 素子を作製し、電界効果移動度を評価した。

【結果と考察】C4PcH₂ 単結晶中の結晶構造は図 2 のように決定した。この結晶構造に基づき DFT 計算を行ったところ、*a* 軸方向の正孔移動度が 27.46 cm²/Vs、電子移動度が 1.58 cm²/Vs と算出され、C6PcH₂ よりも優れたキャリア輸送特性が期待される結果となった。

バーコート法により作製された C4PcH₂ 薄膜中における構造は、図 3 のようになると考えられる。カラム積層間隔、カラム軸間隔はそれぞれ 16.96 Å、15.70 Å と決定され、カラム軸は掃引方向に対し平行であることがわかった。以上の結果から、バーコート法により C4PcH₂ 一軸配向薄膜の作製に成功した。

C4PcH₂ 配向薄膜の電気特性の詳細については当日報告する。

【謝辞】本研究は科学研究費補助金および池谷科学技術振興財団の援助の下に行われた。

[1] Y. Miyake, *et al.*, *Appl. Phys. Express.*, **4**, 021604 (2011). [2] M. Ohmori, *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **109**, 153302 (2016).

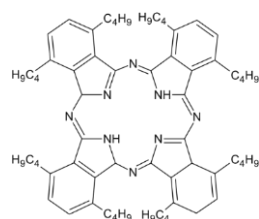


Fig. 1 Molecular structure of C4PcH₂.

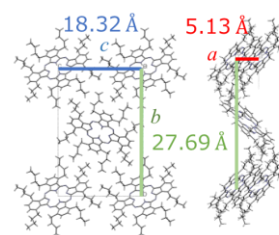


Fig. 2 Crystal structure in C4PcH₂ single crystal.

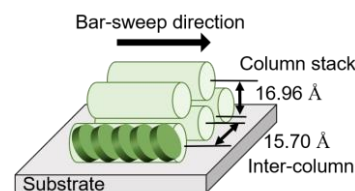


Fig. 3 Column layered structure in C4PcH₂ thin film.