

## 2P137

### アセン系クラスターにおける $\pi$ スタック方向導電性の理論研究

(九大院・総理工<sup>1</sup>、知的財産総合事務所 NEXPAT<sup>2</sup>)

○小林 潤<sup>1</sup>、峰 雅紀<sup>2</sup>、三好 永作<sup>1</sup>

[j-kobayashi8@asem.kyushu-u.ac.jp](mailto:j-kobayashi8@asem.kyushu-u.ac.jp)

#### 【研究背景】

有機 EL、有機電界効果トランジスタ、有機光電変換素子といった有機エレクトロニクスデバイスの材料として一般的に用いられているオリゴ $\pi$ 共役系分子について分子長が長いほど $\pi$ スタック方向の導電性が大きいとの実験報告がある [1]。本研究では量子化学計算を用いてアセン系分子であるナフタレン、アントラセン、テトラセン、ペンタセン  $n$  量体( $n=2-5$ )の $\pi$ スタック方向の導電性を比較することを目的とした。特に、ペンタセンは実際に製品として使用されている材料であり、有機エレクトロデバイス材料の中では非常に高移動度であることで注目されている。

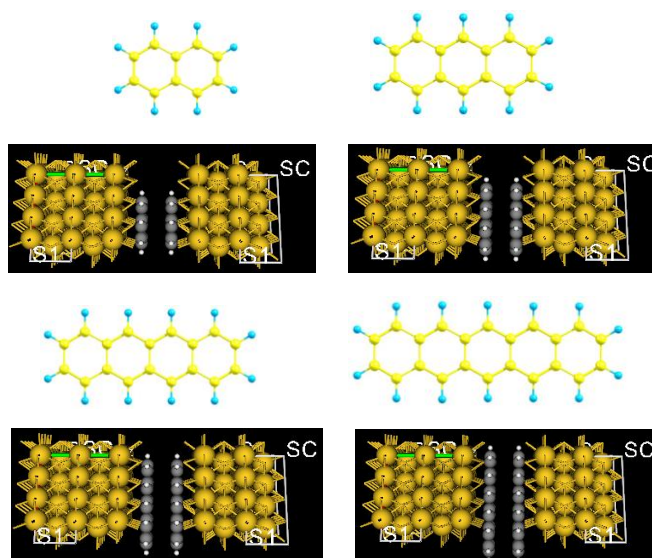


図 1: ナフタレン 2 量体(左上)、アントラセン 2 量体(右上)、テトラセン 2 量体(左下)、ペンタセン 2 量体(右下)の 2 プローブ系模式図

#### 【計算方法】

まず、それぞれの $\pi$ 共役系分子に対して構造最適化計算を行った。計算方法 MP2 で基底関数 6-31G を用いた。構造最適化した後、それぞれの $\pi$ 共役系分子を 2 つの金電極間に $\pi$ スタックが形成されるように挿入し、2 プローブ系を形成させた。この系において非平衡グリーン関数法と密度汎関数法を組み合わせた手法を用いた。この導電性計算は計算方法 DFT/LDA-2P、基底関数 SZP でプログラム Atomistix2.3/VirtualNanoLab1.4 を用いた。このプログラムでは 2 プローブ系の透過スペクトルを算出することができる。この算出した透過スペクトルからランダウアの公式により 2 プローブ系のゼロバイアスコンダクタンスを算出した。このゼロバイアスコンダクタンスを比較することで共役長の異なるアセン系分子の $\pi$ スタック方向の導電性を比較した。

### 【結果と考察】

ナフタレンクラスター、アントラセンクラスター、テトラセンクラスター、およびペンタセンクラスターはテトラセンクラスターを除き、共役長の増大に伴いコンダクタンスも増加した。共役長の長いほど $\pi$ スタック方向の導電性が大きくなった原因を探るためにナフタレン  $n$  量体( $n=2-5$ )、アントラセン  $n$  量体( $n=2-5$ )、テトラセン  $n$  量体( $n=2-5$ )、ペンタセン  $n$  量体( $n=2-5$ )の透過スペクトルを比較した。共役長が長いほど多くの $\pi$ 軌道を持つ。それらの軌道同士の相互作用により分子共鳴レベルが多数形成したために透過スペクトルのピークは共役長が長いほど増加していると考えられる。特に、ゼロバイアスコンダクタンスに関係してくる金電極のフェルミ準位付近でのピークは共役長が長いほど多く、その結果としてフェルミ準位付近の透過係数およびコンダクタンスが大きくなったと考えられる。

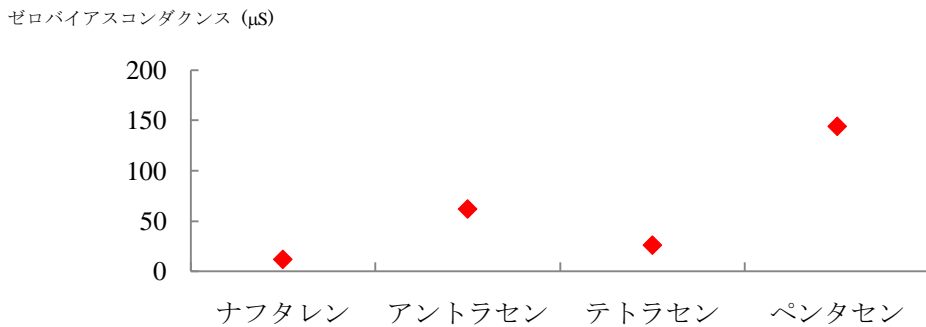


図2 2量体におけるゼロバイアスコンダクタンスの分子長依存性

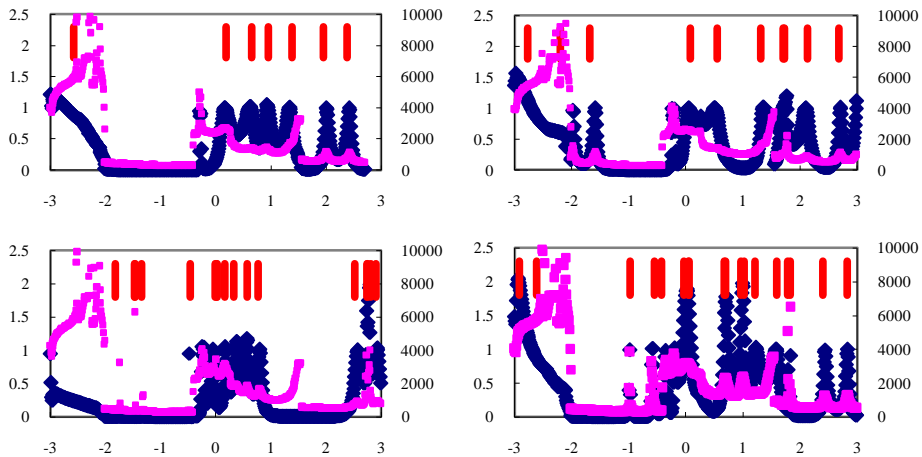


図3 ナフタレン2量体(右上)、アントラセン2量体(左上)、テトラセン2量体(右下)、ペンタセン2量体(左下)の透過スペクトル (青色)