

## アセン系分子のπスタック方向導電性の理論研究

(九大院・総理工)

○小林 潤、峰 雅紀、三好 永作

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

## 【研究意義・目的】

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π共役系分子について、分子長が長いほどπスタック方向の導電性が大きいとの実験報告がある [1]。この実験報告に対する理解を得るために、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( $n=2-5$ )を例にとり、それらのπ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 [2]。

## 【計算方法】

それぞれのπ共役系分子に対してMP2法により基底関数6-31Gを用いて構造最適化計算を行った。構造最適化した後、それぞれのπ共役系分子を2つの金電極間にπ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。2量体についての2プローブ系を図1に示す。この系で非平衡グリーン関数法と密度汎関数法(DFT/LDA-2P)により導電性についての計算を行なった。SZP基底でAtomistix2.3/VirtualNanoLab1.4のシステムを用いた。このプログラムでは2プローブ系の透過スペクトルシステムを算出することができる。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πスタック方向の導電性を比較した。

## 【計算結果と議論】

ベンゼン、ナフタレン、アントラセン、テトラセンおよびペンタセンの  $n$  量体クラスター( $n=2-5$ )について得られたゼロバイアスコンダクタンスの比較を図2に示す。この図からπスタック方向の導電性は  $n$  が増加するにしたがい急激に減少することが分かる(テトラセンクラスターではこの傾向に従わない)。さらにその減少の度合いはπ共役長が長くなるにしたがい緩やかに変化し、ペンタセンではほとんど変化しない。

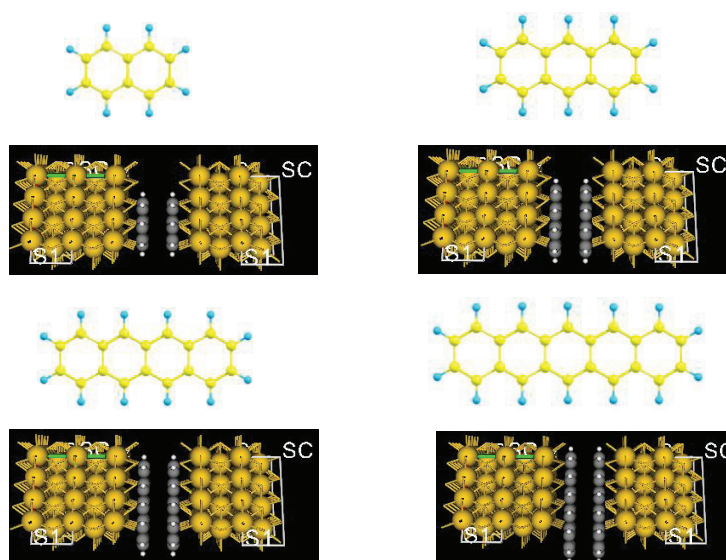


図1: ナフタレン2量体(左上)、アントラセン2量体(右上)、テトラセン2量体(左下)、ペンタセン2量体(右下)の2プローブ系模式図

$\pi$ 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、それぞれの2量体の透過スペクトルを図3に比較した。

共役長が長いほど多くの $\pi$ 軌道を持つ。それらの軌道同士が相互作用することで導電性に関する $\pi$ 軌道準位が多数形成したために共役長が長いほど透過スペクトルのピークが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

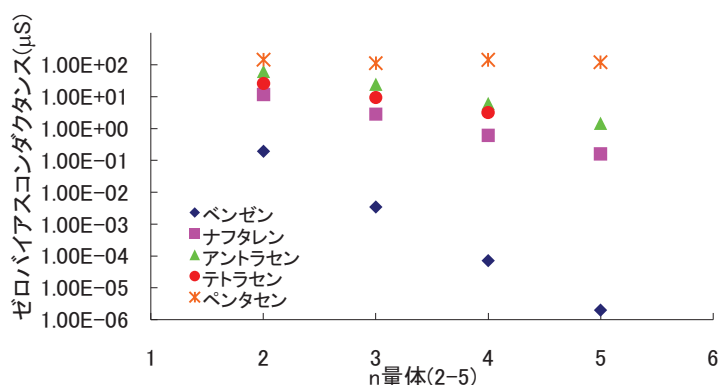


図2 2量体におけるゼロバイアスコンダクタンスの分子長依存性

フェルミ準位付近での $\pi$ 軌道準位は共役長が長いほど多く見られる。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。

#### 【今後の計画】

- テトラセンで導電性が減少した理由を解明する。
- アセン系分子はヘリングボーン構造をとることが知られており、ヘリングボーン構造での導電性の検討を行う。
- オリゴ $\pi$ 共役系分子の中でペンタセンのほかにオリゴチオフェンも導電性が高いことが知られている。チオフェンが属している五員環複素式化合物(チオフェン、フラン、ピロール)での導電性を比較する。

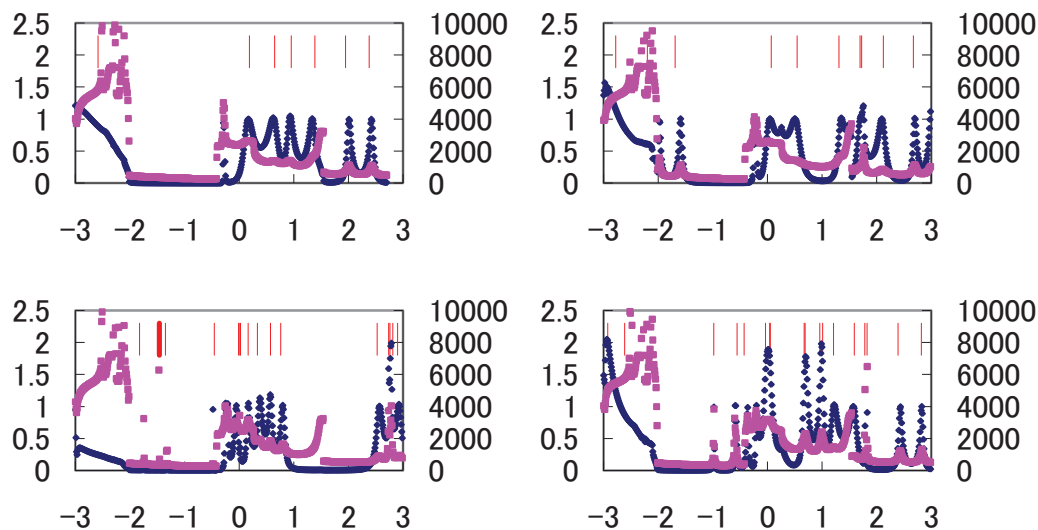


図3 ナフタレン2量体(右上)、アントラセン2量体(左上)テトラセン2量体(右下)、ペンタセン2量体(左下)の透過スペクトル

[1] T. Yasuda, M. Saito, H. Nakamura, and T. Tsutsui, *Chem. Phys. Lett.* **452** (2008) 110.

[2] O. D. Jurchescu, J. Baas, and T. T. M. Palstra, *Appl. Phys. Lett.* **84**(2004)16.