

# W 字型構造を有する含カルコゲン元素縮環パイ共役系分子を用いた高性能有機単結晶トランジスタ

## Chalcogenophene-containing W-shape $\pi$ -conjugated Molecules and Their Application to Single Crystal Field-effect Transistors

阪大産研<sup>1</sup>, JNC 石油化学株式会社<sup>2</sup>, 株式会社リガク<sup>3</sup>

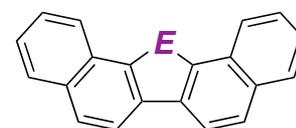
○ 三津井親彦<sup>1</sup>, 岡本敏宏<sup>1</sup>, 山岸正和<sup>1</sup>, 松下武司<sup>2</sup>, 三輪一元<sup>1</sup>, 中原勝正<sup>1</sup>, 添田淳史<sup>1</sup>, 佐藤寛泰<sup>3</sup>, 山野昭人<sup>3</sup>, 植村隆文<sup>1</sup>, 竹谷純一<sup>1</sup>

ISIR, Osaka Univ.<sup>1</sup>, JNC Petrochemical Corp.<sup>2</sup>, Rigaku Corp.<sup>3</sup>

°Chikahiko Mitsui<sup>1</sup>, Toshihiro Okamoto<sup>1</sup>, Masakazu Yamagishi<sup>1</sup>, Takeshi Matsushita<sup>2</sup>, Miwa Kazumoto<sup>1</sup>, Katsumasa Nakahara<sup>1</sup>, Junshi Soeda<sup>1</sup>, Hiroyasu Sato<sup>3</sup>, Akihito Yamano<sup>3</sup>, Takafumi Uemura<sup>1</sup>, Jun Takeya<sup>1</sup>

E-mail: mitsui@sanken.osaka-u.ac.jp

**[緒言]** フェナセン型電子構造を有する化合物群は一般に、アセン型分子に比べて深い最高被占軌道 (HOMO) 準位を有するため、有機半導体素子の電気安定性の観点から有望な材料といえる。今回、我々はフェナセン型電子構造を有する W 字型分子に着目し、分子中央に 16 族元素を導入した種々の誘導体 (ジナフト [1,2-*b*:2',1'-*d*]カルコゲノフェン以下 **DNE-W**, 図 1) に関して系統的な研究を行った。導入するカルコゲン元素の大きさ、ならびに電子的性質により、分子構造、電子状態が劇的に変化し、単結晶トランジスタ特性にも顕著な違いがあることを見いだしたので報告する。



**DNF-W (E = O)**  
**DNT-W (E = S)**  
**DNS-W (E = Se)**

図 1. **DNE-W** の構造。

**[実験と結果]** 合成した W 字型誘導体に関して、X 線結晶構造解析を行ったところ、針状結晶の **DNF-W** は一次元の  $\pi$ - $\pi$  スタッキング構造を有しているのに対し、プレート状結晶を形成する **DNT-W** ならびに **DNS-W** は二次元伝導に有利なヘリングボーン構造をとることが明らかとなった。得られた結晶構造をもとに分子軌道計算を行ったところ、HOMO の軌道対称性は、**DNF-W** では  $a''$  に帰属されるのに対し、**DNT-W** ならびに **DNS-W** では軌道の入れ代わりが生じ、 $a'$  になることが判明した (図 2)。HOMO が  $a'$  に帰属される **DNT-W** ならびに **DNS-W** では、分子の縁上に軌道係数を持ち、特にカルコゲン元素上に大きな軌道係数を有していることから二次元伝導に有利なバランスのとれた大きなトランスファー積分を有している。得られた種々の単結晶を用いてトランジスタを作製、評価したところ、デバイスはすべて典型的な  $p$  型特性を示し、その移動度は **DNF-W** では  $4 \times 10^{-2} \text{ cm}^2/\text{Vs}$  であるのに対し、**DNT-W** と **DNS-W** ではそれぞれ最大で  $1.1 \text{ cm}^2/\text{V}$ ,  $1.8 \text{ cm}^2/\text{V}$  の高移動度を示した。

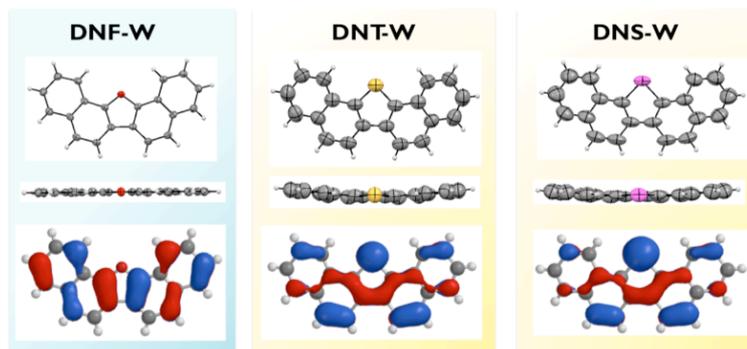


図 2. **DNE-W** の結晶構造と最高被占軌道。