

構造秩序性もつ有機半導体の Correlated Disorder Model の構築とその電荷輸送の温度依存性

Modeling of correlated disorder model for organic semiconductor with structural order and their charge transport mechanism

東工大 像情報, °大野 玲, 新田 武父, 高屋敷 由紀子, 飯野 裕明, 半那 純一

Imag. Sci. & Eng. Lab. Tokyo Inst. Of Tech.,

°Akira Ohno, Takenori Nitta, Yukiko Takayashiki, Hiroaki Iino, Jun-ichi Hanna

E-mail: akira@isl.titech.ac.jp

【背景と目的】液晶性有機半導体は結晶と液体の中間相にある有機半導体として、この 20 年間研究が続けられ、近年、広く知られるようになってきた。液晶は結晶のような高次の秩序が高速の電荷輸送(移動度 $\mu \sim 1\text{cm}^2/\text{Vs}$ 未満)を実現し、液体のような無秩序性がウエットプロセスでの大面積・均一薄膜の作製を可能にするという特徴的な材料である。特に、我々が興味を持つ液晶性有機半導体は層構造を有するスメクティック液晶であり、層に垂直な方向(基本的には分子長軸方向)の並進秩序パラメータの形成に特徴付けられる。近年、広い温度領域にわたり同一相を発現する材料が複数合成されるようになり^{1),2)}、電荷輸送特性の温度依存性の挙動が明らかになりつつある。そこで本研究では、単純化した並進秩序パラメータを用いて構造秩序をもつ凝集系に対して Marcus 式に基づく相関を取り入れた Disorder Model を構築し、このモデルを用いて秩序構造を有する液晶性有機半導体の電荷輸送特性を検討し、実験における室温近辺と低温での温度依存性の挙動を再現できるかについて検討するとともに、秩序構造とエネルギーのディスオーダーの関係を明らかにする電荷輸送モデルを構築したので報告する。

【モデル】モデルでは層に垂直な方向の並進秩序のみが形成されるとする。モデルをシンプルに扱うため、「層内」の分子配置は、格子上に規則正しく並べておく。一方、並進秩序を形成する例として、層に垂直な方向はローレンツ分布関数に従い、層間隔 d で周期的に分布するようにとる。半値幅の調節で、並進秩序パラメータ τ を調節する。その際分子長軸周りを回転する双極子モーメントとキャリアとの相互作用によるクーロンポテンシャルの寄与を各サイトにエネルギー分布として分布させておき、Marcus 式に基づく Monte Carlo Simulation をおこなった。

【結果】上記のキャリア-双極子相互作用による、エネルギー分布は Fig.1 に示すとおり Gauss 分布を示し、DOS は並進秩序パラメータ τ に依存性して小さくなり、また、空間相関を有することが分った。次にエネルギーサイトの Landscape でキャリアを Marcus 式に基づき伝導させ、その移動度の電場依存性を取ったものが Fig.2 である。このモデルでは低温領域では CDM による電場依存性を示すとともに高温では電場依存性がなくなり、再配置エネルギーに基づくアレニウス型の伝導となることが分った。本モデルは実験で移動度の温度依存性・電場依存性の変化をシミュレーションで確認することに成功した。

参考文献

- [1]M. Funahashi, J. Hanna, Mol. Cry. Liq. Cry., 17, 594 (2005).
[2]Y. Takayashiki, J. Hanna, Mol. Cry. Liq. Cry., 411, 265 (2004).

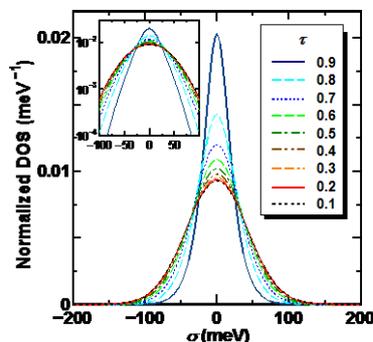


Fig.1 DOS profiles calculated for a translational order parameter

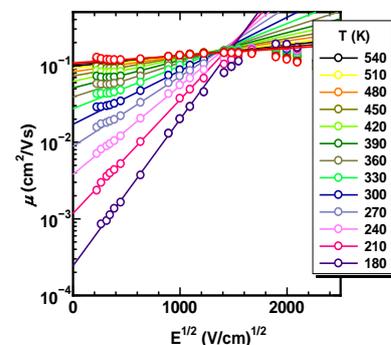


Fig.2 Field dependence of mobilities parametric in temperature