

ペンタセン結晶分子配列乱れに起因した電荷トラップの可能性 Possible Disorder Induced Charge Trapping in Crystalline Pentacene TFTs

日立中研¹, 産総研², 旭化成³ ○安藤 正彦¹, 川崎昌宏¹, 米谷 慎², 南方尚³

HCRL¹, AIST/NRI², Asahi Kasei³, ○M. Ando¹, M. Kawasaki², M. Yoneya², T. Minakata³

ゲート電圧ストレスに伴う有機 TFT の V_{th} シフトを抑制するには、有機半導体/絶縁体界面の電荷トラップ機構の解明が必要である。今回、ラマン分光と分子動力学(MD)計算¹⁾を用いて、有機半導体の分子配列乱れに起因した新しい電荷トラップ機構を見出したので報告する。

実験には 2 種類の結晶構造(低波数ラマン分光: 44cm^{-1} (HT 相)、 50cm^{-1} (LT 相))を有する配向結晶性ペンタセン薄膜 TFT を用いた (図 1)^{2),3)}。ゲート電圧ストレス ($V_{gs}=+50\text{V}$, 15h, N_2 雰囲気)により界面トラップ電子が増加すると LT 相領域が拡大し、光照射または熱アニールでトラップ電子が減少すると HT 相が回復することが in-situ 測定から見出された(図 2)。

MD 計算により、LT 相が安定化するには絶縁膜界面のペンタセン分子に電子が局在する必要があることがわかった¹⁾。電子トラップによりペンタセン分子長軸方向の静的配列揺らぎが最大 0.3nm 増大する(図 3)。

ペンタセン薄膜の分子配列揺らぎが増大すると、分子間電子移動が妨げられて電子が局在化する^{4),5)}。上下層間でペンタセン分子が一直線上に配列する LT 相は、交互配列する HT 相より長軸方向の揺らぎ自由度が大きい。LT 相では、電子間のクーロン反発エネルギーを下げるため長軸方向の分子配列揺らぎが増大して、電子が自己束縛的に局在化する。LT 相の分子配列乱れが増大すると HT 相への相転移が抑制され、電子をトラップした LT 相が安定化すると結論した。

【参考文献】

- 1) Yoneya et al., J. Mater. Chem., **20**, 10397 (2010).
- 2) Brillante et al., Phys. Rev. **B 85**, 195308 (2012).
- 3) Duffy et al., Chem. Mater. **20**, 7252 (2008).
- 4) Heim et al., Nano Lett. **4**, 2145 (2004).
- 5) Ciuchi and Fratini, Phys. Rev. **B83**, 081202(R) (2011).

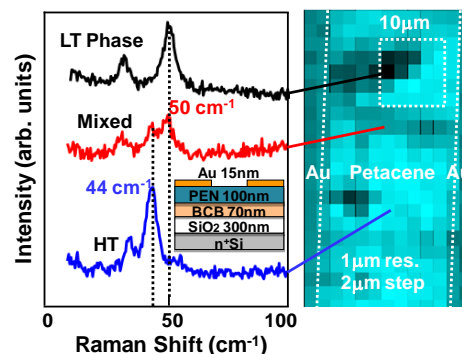


図 1 ペンタセン薄膜の結晶構造分布 (低波数ラマン分光)

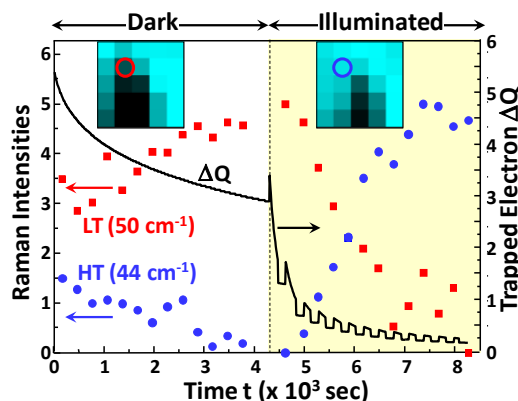


図 2 トラップ電子密度と結晶構造の時間変化

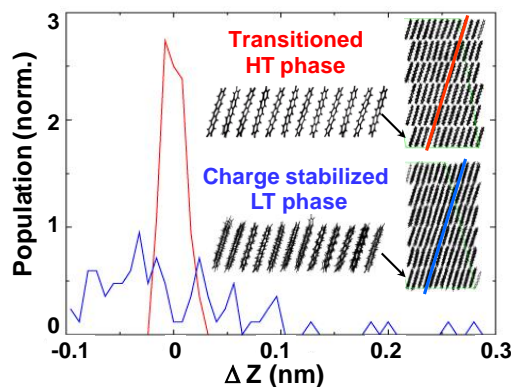


図 3 電子トラップに伴う分子配列揺らぎ(計算)