

Ph-BTBT-10 の単結晶構造解析と多結晶薄膜の分子配向

Single crystal structure of Ph-BTBT-10 and molecular alignment of polycrystalline films

¹東工大 像情報, ²JST-CREST, [○]飯野裕明^{1,2}, 臼井孝之^{1,2}, 半那純一^{1,2}¹Imag. Sci. & Eng. Lab., Tokyo Inst. of Tech., and ²JST-CREST [○]Hiroaki Iino^{1,2}, Takayuki Usui^{1,2},Jun-ichi Hanna^{1,2}

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

序) 有機トランジスタの実用には、高い移動度に加えて、ウェットプロセスで均一な薄膜が容易に作製でき、かつ、デバイス作製に必要な製膜後の熱プロセスにも耐えられる高い耐熱性を有する薄膜材料が不可欠である。我々は、このような要求を満たす可溶性有機半導体材料として、高次スメクチック相を有する液晶性フェニル-ベンゾチエノベンゾチオフェン誘導体 (Ph-BTBT-10 : Fig 参照) を開発し、そのデバイス特性の評価を行ってきた。この材料は溶液プロセスにより液晶薄膜を前駆体として結晶膜を作製する[1]ことにより、真空蒸着膜に匹敵する高い均一性と平滑な表面性をもつ多結晶薄膜を作製できる。さらに、この多結晶薄膜を 120°C、5 分程度の短時間、熱アニールを加えることにより、結晶構造がモノレイヤー構造からバイレイヤー構造に変化し、移動度は大幅に改善され、10cm²/Vs を超える高い移動度を有するトランジスタが実現できることを明らかにした[2]。本研究では、Ph-BTBT-10 の高移動度を示すバイレイヤー構造の詳細を明らかにするため、単結晶の構造解析および、熱アニールによる分子配向の変化について検討した。

実験) Ph-BTBT-10 の単結晶はキシレン溶液から再結晶化により作製した。単結晶構造解析は Rigaku 社製の R-Axis RAPID II/R を用いて行った。多結晶薄膜における分子の配向の情報を得るため TOF-SIMS による厚さ方向の組成分析を行なった。また、単結晶における分子配置より Transfer Integral についても検討を加えた。

結果) Ph-BTBT-10 の単結晶では、X 線構造解析の結果から、Ph-BTBT コアは Herringbone 構造をとり、レイヤー間では Ph-BTBT コアが向かい合ったバイレイヤー構造をとっていることが明らかになった。モノレイヤー構造をとる製膜直後の膜では、Ph-BTBT コア部にのみ存在する硫黄原子の厚さ方向の TOF-SIMS によるプロファイルには分布が見られないのに対し、120°C 5 分間の熱アニールを行った薄膜では、硫黄原子の分布プロファイルには 2 分子長に対応した約 5nm ほどのピークが観測された。これらの結果を総合すると、多結晶薄膜は製膜直後ではモノレイヤー構造であるが、120°C の熱アニールにより、溶液から再結晶により得られた単結晶と同様に、Ph-BTBT コアが向かい合ったバイレイヤー構造に変化するものと考えられる。この単結晶構造解析の分子配置をもとに Transfer Integral を計算すると、レイヤー内の T1、T2、T3 がそれぞれ 55、17、43meV であるのに加えて、コア部が向かい合ったレイヤー間にも 8meV 程度の有意な値を持つことが分かった。

[1] H. Iino and J. Hanna, Adv. Mater., 23, 1748 (2011).

[2] 飯野、臼井、半那、第 74 回応用物理学会秋季学術講演会 19a-C5-7 (2013).

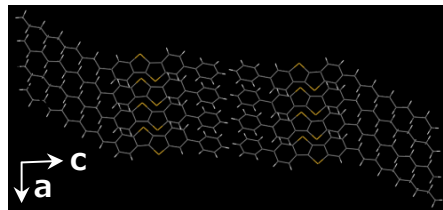
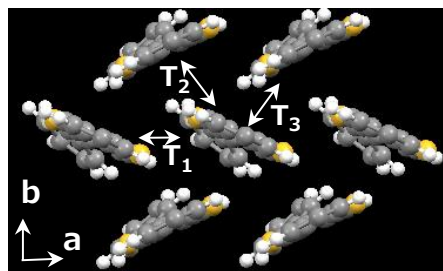
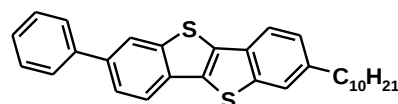


Fig. Chemical structure and single crystal structure of Ph-BTBT-10.