

分子化合物半導体(diC_8BTBT)(TCNQ)のフロンティア電子構造の観測

Observation of frontier electronic structure for (diC_8BTBT)(TCNQ)

○古池 晴信¹、堤 潤也²、松岡 悟志²、井上 悟^{2,3}、佐藤 利磨¹、長谷川 達生^{2,4}、金井 要¹

(1. 東理大、2. 産総研、3. 日本化薬、4. 東大工)

○Harunobu Koike¹, Jun'ya Tsutsumi², Satoshi Matsuoka², Satoru Inoue^{2,3}, Kazuma Sato¹,

Tatsuo Hasegawa^{2,4}, Kaname Kanai¹

(1. Tokyo Univ. of Science, 2. AIST, 3. Nipponkayaku, 4. U. Tokyo)

E-mail: 6214701@ed.tus.ac.jp

電子供与（ドナー）性（D）と電子受容（アクセプター）性（A）の2種類の分子からなる分子化合物半導体は、D-A間の電荷移動（CT）相互作用により、単一成分材料とは異なるエネルギーバンド構造を形成する。このような電子構造に由来し、大気安定性や両極性動作など、単一成分系にはない優れた物性が期待される。近年、*p*型半導体のアルキル化ベンゾチエノベンゾチオフェン（ diC_8BTBT ）※とフッ素化テトラシアノキノジメタン（ F_nTCNQ ； $n = 0, 2, 4$ ）を組み合わせた（ diC_8BTBT ）(F_nTCNQ)が、薄膜化に適した高い層状結晶性を示す分子化合物を形成し、大気中で安定な*n*型のトランジスタ特性（ $\mu = 0.4 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ ）を示すことが報告された^[1,2]。

本研究では、（ diC_8BTBT ）(F_nTCNQ)薄膜の大気安定性や*n*型特性の要因となる電子構造の特徴を明らかにすることを目的として、エネルギーギャップ周辺のフロンティア電子構造を紫外光電子分光法（UPS）と逆光電子分光法（IPES）を用いて測定した。図1に測定結果を示す。分子軌道計算との比較から、（ diC_8BTBT ）(TCNQ)薄膜のHOMO（c）、HOMO-1（d）、LUMO（e）が、 diC_8BTBT 薄膜のHOMO（f）、HOMO-1（g）とTCNQ薄膜のLUMO（b）の電荷移動相互作用により生じたエネルギー準位であることが分かった。また錯形成に由来する電荷移動相互作用の大きさを、それぞれのエネルギー準位のシフト幅から推定した（HOMOが0.79 eV、HOMO-1が0.81 eV 高束縛エネルギー側に、LUMOが0.99 eV 低束縛エネルギー側にシフト

した。）。講演では、電荷移動相互作用と電子構造の相関をもとに大気・熱安定性やトランジスタ特性についても議論する。※日本化薬（株）提供 [1] J. Tsutsumi, *et. al.*, *J. Mater. Chem. C*, **3**, 1976 (2015), [2] Y. Shibata, *et. al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **106**, 143303 (2015), [3] W. D. Grobman, *et. al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **32**, 534 (1973)

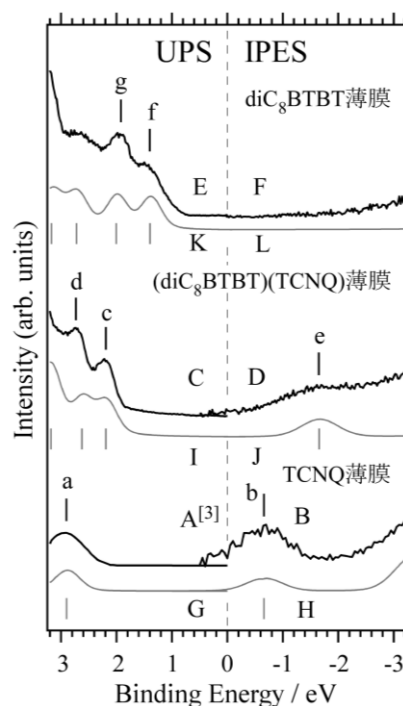


図 1: TCNQ 薄膜、（ diC_8BTBT ）(TCNQ) 薄膜、 diC_8BTBT 薄膜の UPS と IPES の結果。A と B は TCNQ 薄膜の UPS^[3] と IPES、C と D は（ diC_8BTBT ）(TCNQ) 薄膜の UPS と IPES、E と F は diC_8BTBT 薄膜の UPS と IPES の結果をそれぞれ表している。G、H、I、J、K、L は、それぞれの UPS と IPES のシミュレーション結果（B3LYP/6-31G）を表している。