

液晶性有機半導体における構造秩序性と 関連のあるディスオーダーモデル

Correlated Disorder Model Limited by Structural Order Parameter in Self Organizing Molecular Semiconductors

○大野 玲、新田 武父、高屋敷 由紀子、飯野 裕明、半那 純一（東工大・像情報）

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

(Imaging Science and Engineering Lab., Tokyo Inst. Of Tech)

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

【背景】これまで、液晶相を有する有機半導体が結晶相において、移動度 $\mu \geq 1 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ の高速の電荷輸送を示す例は幾つか報告されている。しかし、有機半導体においては、アモルファスをはじめとして、液晶相を含む結晶相以外の相で $1 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ を超える高速の電荷輸送が認められた例はほとんどない。液晶相は結晶と異なり、構造秩序が揺らぎもち、また、秩序性も結晶ほど完全ではないが、現状では、移動度が $1 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ を超えない理由は明らかではない。このことを明らかにすることは液晶相の電荷輸送特性の改善にとどまらず、液晶物質の相転移を利用して配向制御された結晶薄膜を作製し、有機半導体として用いる場合、どのような液晶相構造を構築すればよいのか、高品質な材料を得るにはどのような物質を開発すれば良いのか等の指針となるはずである。

【目的】有機半導体におけるホッピングによる移動度の温度・電場依存性は、通常 Gaussian Disorder Model(GDM)や Correlated Disorder Model (CDM)により説明される。このとき、移動度の温度依存性は、キャリアの局在準位のガウス分布の標準偏差であるエネルギーのディスオーダーの値と分子間ホッピングにおける再配置エネルギーの値により特徴付けられる。しかし、隣接分子間（分子間距離 $< 5 \text{ \AA}$ ）では外部電場に由来するポテンシャルエネルギー差は小さいので、エネルギー準位に空間相関がなければ高電場 ($E \geq 10^6 \text{ V/cm}$) でない限り、電場が移動度に与える影響は小さい。しかし、分子の配置に空間相関がある場合は、相関長程度の外部電場に由来するエネルギー差が、局在準位の揺らぎによるエネルギー差を埋める程に大きくなるため、低電場領域から移動度の電場依存性が現れる。液晶相ではこの空間相関は秩序パラメーターによって変化すると考えられる。そこで本研究ではスメクティック液晶相における並進秩序性と空間相関との関係と、移動度の電場依存性から解明を試みた。分子動力学計算を用いて構築されたスメクチック液晶相をモデルとして、並進秩序パラメーターに従ってエネルギーのディスオーダーと空間相関が変化する CDM シミュレーションを構築し、検討を行った。

【結果と考察】図は異なる再配置エネルギーの値に対して、CDM シミュレーションをもちいて、エネルギーのディスオーダーが $\sigma = 53 \text{ meV}$ の時の移動度の電場依存性の傾きについて温度 T の -1.5 乗に対し依存性を取ったものである。再配置エネルギーが 200 meV 以上で温度依存性の傾きが大きくなるのは、外場を印加しても外場によってホッピングアップ時に必要なエネルギーを稼ぐことができないことを示している。当日は構造秩序パラメーターがエネルギー準位の空間相関を制御する関係とそれが再配置エネルギーとの値によってどのように変化するか明らかにする予定である。

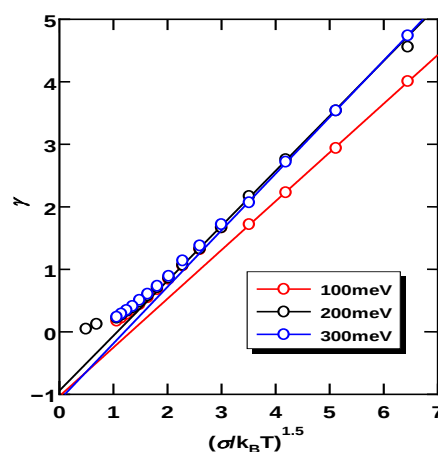


Figure: Slope γ (Field dependence of Mobility) v.s. $(\sigma/k_B T)^{1.5}$ in CDM