

## フェニル基を有する硫黄架橋 V 字型有機半導体の伝導挙動

Charge-transporting Behavior of Phenyl-substituted Sulfur-bridged  
V-Shaped Organic Semiconductors東大院新領域<sup>1</sup>, 理研 GEMS<sup>2</sup>, 筑波大数物<sup>3</sup>, 富山高専<sup>4</sup>, リガク<sup>5</sup>, JST さきがけ<sup>6</sup>○(M2) 沢辺 千鶴<sup>1,2</sup>, 三谷 真人<sup>1,2</sup>, 熊谷 翔平<sup>1</sup>, 石井 宏幸<sup>3</sup>, 橋爪 大輔<sup>2</sup>, 山岸 正和<sup>4</sup>,  
佐藤 寛泰<sup>5</sup>, 山野 昭人<sup>5</sup>, 竹谷 純一<sup>1</sup>, 岡本 敏宏<sup>1,2,6</sup>The Univ. of Tokyo<sup>1</sup>, RIKEN<sup>2</sup>, Univ. of Tsukuba<sup>3</sup>, NIT, Toyama Coll.<sup>4</sup>, RIGAKU corp.<sup>5</sup>,  
PRESTO, JST<sup>6</sup>○Chizuru Sawabe<sup>1,2</sup>, Masato Mitani<sup>1,2</sup>, Shohei Kumagai<sup>1</sup>, Hiroyuki Ishii<sup>3</sup>, Daisuke Hashizume<sup>2</sup>,  
Masakazu Yamagishi<sup>4</sup>, Hiroyasu Sato<sup>5</sup>, Akihito Yamano<sup>5</sup>, Jun Takeya<sup>1</sup>, Toshihiro Okamoto<sup>1,2,6</sup>

E-mail: 4372493852@edu.k.u-tokyo.ac.jp

これまでの有機半導体材料の開発では、半導体分子に局在化したキャリアが分子間を伝導するホッピング伝導に基づいた分子設計が主に行われてきた。一方で、最近  $10 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  を超える高移動度の有機半導体材料が報告されるようになり[1]、ホール効果や移動度の温度依存性の測定から、分子間に非局在化したキャリアが自由電子的に伝導するバンド伝導が明らかにされている[2]。バンド伝導機構では有効的な分子軌道の重なりと分子間振動の抑制が移動度の向上に寄与する。

本研究では、分子間振動の抑制のための新たな分子設計に取り組んだ。具体的には、当研究室で開発された硫黄架橋 V 字型パイコアである DNT-V[3]に、分子間の C-H $\cdots\pi$  相互作用が期待できるフェニル基を導入した一連の誘導体に着目した。特に、デシルフェニル基を置換基に持つ **C<sub>10</sub>Ph-DNT-VW**(Fig. 1)は単結晶薄膜を用いた OFET でキャリア移動度  $8 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  を示し、さらに四端子移動度の負の温度依存性から材料中でのバンド伝導が確かめられた (Fig. 2)。また、単結晶構造解析から得られた構造に基づき分子動力学計算を行なったところ、分子長軸方向の並進振動振幅がアルキル置換体 **C<sub>10</sub>-DNT-VW** と比べて 10%程度減少していることが示された。当日は一連の誘導体の合成と置換基が結晶構造、分子間振動や電荷輸送特性に与える影響について述べる。

[1] a) K. Takimiya *et al.*, *Adv. Mater.*, **23**, 1222 (2011). b) J. Hanna *et al.*, *Nature Commun.*, **6**, 6828 (2015). [2] a) J. Takeya *et al.*, *Phys. Rev. B*, **81**, 161306(R) (2010). b) K. Marumoto *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **97**, 256603 (2006). [3] T. Okamoto *et al.*, *Adv. Mater.*, **25**, 6392 (2013).

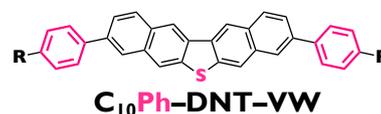
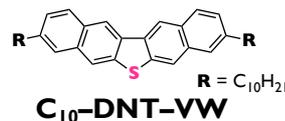


Fig. 1 Chemical structures of DNT-V derivatives.

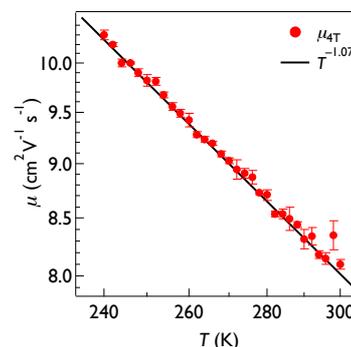


Fig. 2 Temperature dependence of mobility for **C<sub>10</sub>Ph-DNT-VW** in single crystals.