

ジチエノベンゾチジオフェン錯体を用いた有機単結晶トランジスタ

Organic Single-Crystal Transistors Based on Charge-Transfer Complexes of DTBDT

1. 東工大理工, °飯嶋 広大¹, 眞田 怜¹, 劉 東昊¹, 佐藤 諒之介¹, 川本 正¹, 森 健彦¹

1.Tokyo Tech, °Kodai Iijima¹, Ryo Sanada¹, Dongho Yoo¹, Ryonosuke Sato¹, Tadashi kawamoto¹,

Takehiko Mori¹

E-mail: iijima.k.ae@m.titech.ac.jp

ドナーとアクセプターが交互に積層する電荷移動錯体は半導体であり、有機トランジスタへの応用がいくつも報告されている。単純な摂動理論によれば $t_h^{\text{eff}} = t_e^{\text{eff}} \sim t^2 / \Delta E$ に従い、電子もホールも同程度のトランスファー積分を持ち、アンバイポーラの伝導が期待される。しかしながら特に TCNQ 錯体で

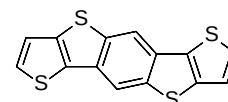
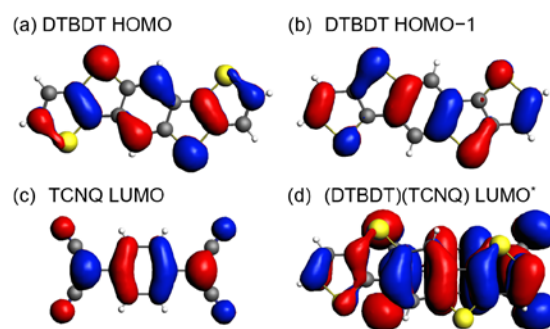


Fig. 1 DTBDT.

は電子伝導のみを示す傾向にあり、電荷移動錯体における詳細な伝導機構は解明できていない。当研究室では過去に BTBT ([1]benzothieno[3,2-b][1]-benzothiophene) やその窒素置換体である DBPP (dibenzopyrrolo[3,2-b]pyrrole) の電荷移動錯体についてトランジスタ特性を報告した¹。(BTBT)(F_nTCNQ) (n = 0, 2, 4)は電子伝導のみであったが、(DBPP)(DMDCNQI)はアンバイポーラのトランジスタ特性を示した。本発表では DTBDT (ditheno[2,3-d;2'3'-d']benzo[1,2-b;4,5-b']dithiophene) をドナー分子とする電荷移動錯体のトランジスタについて報告する。

(DTBDT)(TCNQ) と (DTBDT)(F₄TCNQ) は既報であるが²、新たに (DTBDT)(F₂TCNQ) と (DTBDT)(DMDCNQI) を合成し、単結晶トランジスタを作製した。すべて n 型で動作したが (DTBDT)(DMDCNQI) はアンバイポーラのトランジスタ動作をする結晶も存在した。(DTBDT)(TCNQ) が最も高い移動度 $0.1 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ を示した。DTBDT 錯体は交互積層の構造で、S-S



* Small contribution is emphasized by using small isosurface level.

Fig. 2 Molecular orbitals.

コンタクトに起因するカラム間のトランスファー積分 (HOMO-HOMO) を持っている。しかしながら (DTBDT)(DMDCNQI) 以外は電子伝導のみを示したことから、ドナー間の相互作用はトランジスタ動作に大きな影響を与えていないと考えられる。D-A-D、A-D-A の triad におけるエネルギー分裂より、 t^{eff} を算出したところ、 t_h^{eff} に対して t_e^{eff} が有意に大きく、また (DTBDT)(DMDCNQI) の t_h^{eff} は比較的大きい値であったことから、トランジスタ特性と矛盾のない結果となった。D-A の diad における分子軌道計算の詳細な解析より、キャリアの非対称性は、電子伝導に DTBDT の HOMO-1 が大きく寄与していることが原因であることが示唆された。このことは diad の LUMO に、DTBDT の HOMO-1 が大きく混成している様子からも理解できる (Fig. 2)。

1 T. Higashino *et al.*, *J. Mater. Chem. C*, 2016, **4**, 5981; R. Sato *et al.*, *J. Phys. Chem. C*, 2017, **121**, 6561; C. Fujisue *et al.*, *RSC Adv.*, 2016, **6**, 53345–53350. 2 A. Chernenkaya *et al.*, *J. Chem. Phys.*, 2016, **145**, 34702.