

p 型有機半導体 TMTES-pentacene 薄膜相の単結晶 X 線構造解析とバンド計算およびトランジスタ特性

Single-Crystal X-Ray Structure Analysis, Band Calculation and Transistor Characteristics of TMTES-pentacene Thin Films

山形大院 ○^(M2) 圓岡 岳, 松井 弘之, 片桐 洋史, 藤原 渉, 竹田 泰典, 時任 静士

Faculty of Engineering, Yamagata Univ. ○Gaku Tsuburaoka, Hiroyuki Matsui, Hiroshi Katagiri, Wataru Fujiwara, Yasunori Takeda, Shizuo Tokito

E-mail: h-matsui@yz.yamagata-u.ac.jp

【はじめに】 1,4,8,11-tetramethyl-6,13-triethylsilylethynyl pentacene (TMTES-pentacene) (Fig. 1a) は高性能な p 型有機半導体として知られ、塗布型薄膜トランジスタにおける移動度は $5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 、コンタクト抵抗は $300 \ \Omega \cdot \text{cm}$ と報告されている[1,2]。しかしながら、TMTES-pentacene の薄膜における結晶構造は未だ報告されておらず、構造と物性の関係性も明らかでない。そこで本研究では、まず TMTES-pentacene の単結晶 X 線回折を行ったところ、既報の結晶構造(バルク相)とは異なる新たな結晶構造(薄膜相)を得ることに成功し、それが実際の薄膜デバイス中の結晶構造を支持することを明らかにした。その後、得られた薄膜相の結晶構造をもとにバンド計算を行ったところ、TMTES-pentacene はルブレンや C8-BTBT などの高移動度有機半導体材料よりも優れた有効質量を有することが明らかとなった。

【実験】 クロロホルムとエタノールを用いた溶媒蒸気拡散法によりプレート状の単結晶試料を作製し、RIGAKU 社製単結晶 X 線構造解析装置 Saturn724 (X 線源: Mo) を用いて -180°C で測定を行った。

【結果と考察】 既報の結晶構造(バルク相)と今回新たに得られた結晶構造(薄膜相)を Fig. 1b,c に示す。既報のバルク相は 3 次元的なパッキングであるのに対し、新たに得られた薄膜相は 2 次元的なヘリングボーン型パッキングであった。また薄膜の粉末 XRD プロファイルは単結晶構造と良い一致を示し、薄膜 X 線回折では out-of-plane 方向にヘリングボーン層間隔に対応する回折プロファイルが得られた。最後に、得られた薄膜相の結晶構造をもとにバンド計算を行い、3 方向の有効質量を求めたところ、およそ a 軸方向に $0.67 m_0$ 、b 軸方向に $1.7 m_0$ であった (m_0 は自由電子の質量)。これは高移動度で知られるルブレンや C8-BTBT などよりも優れた値であり、TMTES-pentacene が半導体としての高いポテンシャルを有する材料であることが明らかとなった (Fig. 2)。トランジスタ特性と結晶構造の双方から議論を進めていく。

[1] K. L. McCall *et al.*, *Adv. Funct. Mater.* **24**, 3067 (2014) [2] S. D. Ogier *et al.*, *Org. Electron.* **54**, 40 (2018)

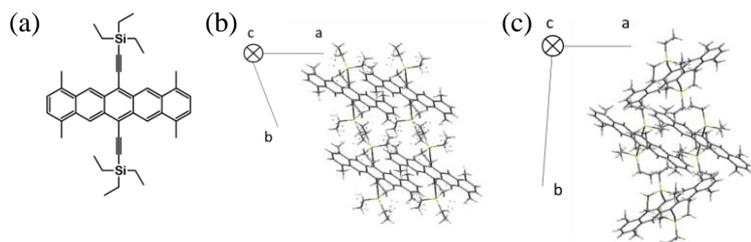


Fig. 1 (a) Molecular structure, (b) crystal structure in bulk phase, and (c) crystal structure in thin-film phase of TMTES-pentacene

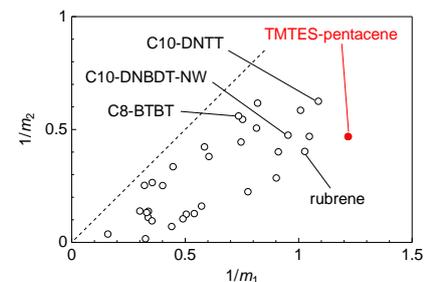


Fig. 2 Inverse of effective mass for various materials