

有機半導体 PhBTBT10 の二層一単層周期結晶多形間転移モデルの再検討

Bilayer-monolayer transition model of organic semiconductor PhBTBT10 revisited

産総研 米谷 慎

AIST, Makoto Yoneya

E-mail: makoto-yoneya@aist.go.jp

はじめに フェニルベンゾチエノベンゾチオフェン誘導体 PhBTBT10 は、 $10 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ を越える高キャリア移動度の有機薄膜トランジスタが溶液スピコートにより形成可能であることが報告されている[1]。この高移動度を実現するには、短時間の熱アニールによる単層周期結晶から二層周期結晶への転移が必要とされているが[1]、この構造転移や単層周期結晶の構造についての詳細は不明である。我々は既報で、この PhBTBT10 の二層一単層周期結晶多形間転移のモデルとして、3あるいは4ステップで転移するモデルと対応する二つの単層周期結晶モデル構造のキャリア移動度を MD/DFT/MC 連携計算により比較、報告した[2]。本報告では、より少ない2あるいは3ステップで転移するモデルと対応する単層周期結晶モデル構造について検討した結果を報告する。

検討内容 XRD 測定[3]により既知の PhBTBT10 の二層周期単結晶構造の単位胞から、今回は、図1に示す、2あるいは3ステップの並進操作により得られる二つの単層周期構造候補のキャリア移動度を既報[2]と同じく MD/DFT/MC 連携計算により比較、検討した。図1の転移モデルは、既報[2]での1分子毎ではなく2分子毎に並進させることにより、回転が不要な純粋に並進だけの操作で二層一単層周期転移する。

検討結果 上記 MC 計算によるホール移動度の序列は、二層周期結晶を基準(1)とすると、アンチパラレル構造(0.12)→二層周期結晶(1)→ナノ相分離構造(7)であった。報告[1]されている TFT 移動度の序列は、単層周期結晶(0.14)→二層周期結晶(1)であることから、既報[2]同様、今回の結果からもアンチパラレル構造(図1c)が単層周期結晶構造としてより確からしいと考えられる。

参考文献

- [1] Iino et al., *Nat. Commun.*, **6**, 6828 (2015).
- [2] Yoneya, *J. Phys. Chem. C*, **122**, 22225 (2018).
- [3] Minemawari et al., *APEX*, **7**, 091601 (2014).

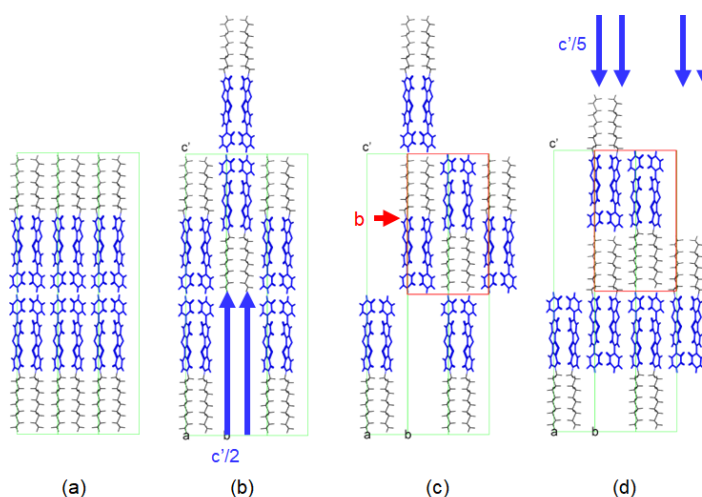


Fig. 1 Transformation model from (a) the bilayer crystal to (c) the antiparallel and (d) the nanosegregated monolayer crystals.