有機半導体の電子移動と Gaussian Disorder Model における C-factor との関係

Relationship between electron transfer and C-factor of Gaussian Disorder Model in organic semiconductors

東工大未来研 [1] ○大野　玲，新田　武父，高屋敷　由紀子，半那 純一，飯野　裕明
Akira Ohno, Takenori Nitta, Yukiko Takayashiki, Jun-ichi Hanna, and Hiroaki Iino
Imaging Science and Engineering Research Center, Tokyo Inst. of Tech.
E-mail: akira@isl.titech.ac.jp

【背景】近年、我々は液晶性有機半導体の一種である、Ph-BTBT-10 (2-phenyl-7-decyl benzothino benzo thiophene)を作成し、溶液プロセスで、液晶を前駆体として作成した薄膜による FET の移動度が 10 cm²/Vs を超えることを確認、単結晶と比較しても遜色ない高速なデバイスの実現が可能であることを明らかにしてきた。[1] 一方で我々はその前駆体である液晶相が高次の SmE 相であり、共役部位については既に結晶と見なしてよい高い配向・並進秩序性を有しているのにもかかわらず、なぜ結晶のような高速の電荷輸送がこれまでのところ実現できないのか検討してきた。[2] 中でも Ph-BTBT の誘導体である Ph-BTBT-4S3 は SmE 相であることを確認した −120℃～180℃の広い温度領域に渡って SmE 相を示し、TOF 法における移動度の温度、電界強度依存性が得られた。このとき低温領域については Gaussian Disorder Model (GDM) で説明できる特徴的な温度、電界強度依存性を示すことを確認した。

【目的】そこで Ph-BTBT-4S3 をはじめとして、いくつかの液晶で SmE 相を示す液晶性有機半導体について TOF 法で測定した移動度の温度依存性について、Marcus 式を電子移動とする GDM を用いてより詳細に解析することにした。一般的に Marcus 式を電子移動として導入した GDM では、これまで電界強度を $F = 0$ に外挿して電界に異存しない項を

$$\mu_{F=0} \propto \exp\left[-\frac{E_a}{k_B T} - C\left(\frac{\sigma}{k_B T}\right)^2\right] \quad \cdots\cdots ①$$

と近似して C をどのように決めればよいかが議論されている。ここで E_a は Marcus 式における再配置エネルギーに由来した活性化エネルギーである。この C-factor は、E_a と σ の比、次元性、パーコレーション条件、空間相関に依存して変化する。[3-5] またこれより $kT_c = C\sigma^2/E_a$ から、移動度の GDM 型の温度依存性と活性化型の温度依存性の変化を示す critical temperature T_c を、計算・理論上導出しているが、その値はエネルギーのディスオーダーが σ = 100meV を超えるため T_c は通常 600-1500K の高温になり、これまで実験的には確認されていなかった。一方、本液晶相においては σ が100meV より小さいので T_c が実験的に得られるのではないかと期待できる。

【結果と考察】 図に示すように他の材料では確認することのできない、critical temperature T_c=293K を境に GDM 型から活性化型に移動度の挙動が変化していることが確認できた。そこで①式で示されるとされるゼロ電界移動度の温度依存性について、$T > T_c$ では Arrhenius 型、$T < T_c$ の温度域では GDM 型の温度特性であるとして解析を行った。図のようにアレニウスプロットから E_a=66.6meV が得られ、この値を代入した①式から得た C-factor の値に対する σ の挙動を図の inset に示した。なお、C = 0.5 とした時、σ = 91meV を得た。この C-factor の挙動は E_a と σ とのバランスで決まる。発表ではその挙動がＧＤＭシミュレーションを用いてどのような挙動を示すかさらに明らかにする。

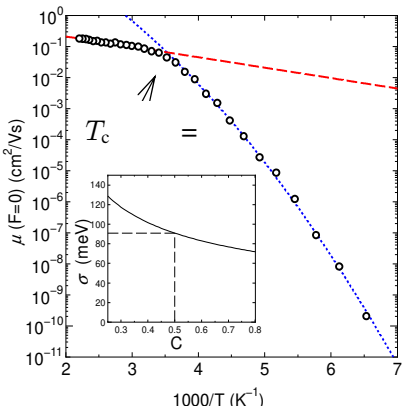

Figure Temperature Dependence of zero field mobility. Inset shows simulated σ as a function of

References
[1] H. Iino, T. Usui, and J. Hanna, Nature comm., 6, 6828 (2015).
[2] 大野、新田、高屋敷、飯野、半那、応用物理学会春季学術講演会 15a-311-10 (2017); 10a-W810-9 (2019).
[3] I. I. Fishchuk, A. Kadashchuk, H. Bässler, S. Nešpůrek, Phys. Rev. B, 67, 224303 (2003).
[4] J. Cotter, R. Coehoorn and P. A. Bobbert, Phys. Rev. B, 85, 245205 (2012).
[5] K. Seki and M. Wojcik, J. Chem. Phys. 145, 034106 (2016).

© 2020年 応用物理学会