

有機半導体の電子輸送に対する

空間相関のあるエネルギーのディスオーダーの影響

Effect of Spatially Correlated Energetic Disorder on
Electron Transport of Organic Semiconductor

東工大未来研 °大野 玲, 新田 武父, 高屋敷 由紀子, 半那 純一, 飯野 裕明

Tokyo Tech., °Akira Ohno, Takenori Nitta, Yukiko Takayashiki, Jun-ichi Hanna, and Hiroaki Iino

E-mail: akira@isl.titech.ac.jp

【背景】我々はこれまで、液晶を前駆体として溶液プロセスで作成した、有機半導体 Ph-BTBT-10 (2-phenyl-7-decyl benzothino benzo thiophene)について、薄膜の FET 移動度が $10 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ を超えることを確認し、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] 一方でこのような材料における液晶相での TOF 移動度は $\sim 10^{-1} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ を超えることない。結晶性の有機半導体はその秩序性から”バンドライク”な電子伝導が実現することで高速の電子輸送が実現するとされるが、秩序形成が、電子輸送にどのように影響するのであろうか。我々は Ph-BTBT の誘導体である Ph-BTBT-4 S3 において TOF 移動度の温度・電界強度依存性が、低温領域では Gaussian Disorder Model (GDM) で説明でき、 $T_c = 293\text{K}$ 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し、その挙動の変化を C-factor と呼ばれる GDM のパラメータを導入して[2,3]説明した。しかし高温領域での活性化型の原因は説明がつかなかった。[4]

【目的】そこで本研究では、電子移動については室温での各振動準位を介した電子移動を取り扱うため Lin らの提案した核トンネリングの quantum CT を用いることにした[5]。そのうえでエネルギーの基底状態は液晶の秩序性の乱れを反映したディスオーダーモデルを用いて明らかにすることにした。

【考察】図は Ph-BTBT-4 S3 の測定した TOF 移動度の高温領域での電場・温度依存性である。高温領域においては電場依存性が解消され、エネルギーのディスオーダーの寄与が消失したかのように見えるが電場依存性が消えたのであって、エネルギーのディスオーダーの寄与がなくなったことを意味しない。モデルについては、シドニー大学の J. R. Reimers 教授による DUSHIN code [6] を持ちいて基準振動解析を行った。これより、ホアン・リー因子が求められ、核トンネリングの電子移動式に代入する。この CT rate に基づいて空間相関のあるディスオーダーモデルを構築し、その挙動を検討した。

発表では高温領域の移動度の温度依存性の挙動が、本モデルで説明ができることを示し、高温領域もエネルギーのディスオーダーの影響があることを示す。一方で結晶ではこのようなディスオーダーの影響がなくなった状態であり、秩序性の形成による電子輸送の高速化が、電子移動の改善によるのではなく、むしろ空間相関のあるエネルギーのディスオーダーの消失が主要因であることを、明らかにする。

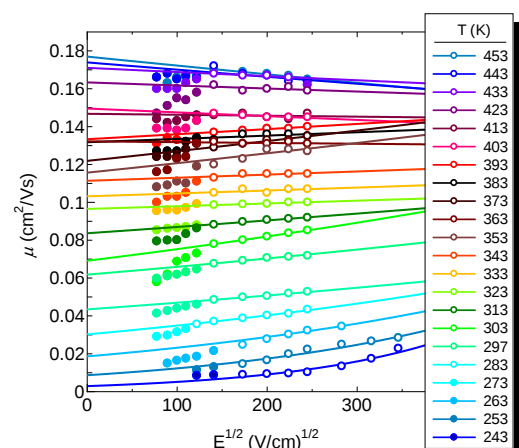


Figure Field dependence of TOF mobility in Ph-BTBT-4S3 parametrized in temperature. (high temperature range)

References

- [1] H. Iino, T. Usui, and J. Hanna, Nature comm., 6, 6828 (2015).
- [2] K. Seki and M. Wojcik, J. Chem. Phys. 145, 034106 (2016).
- [3] I. I. Fishchuk, A. Kadashchuk, H. Bässler, S. Nešpůrek, Phys. Rev. B, 67, 224303 (2003).
- [4] 大野、新田、高屋敷、飯野、半那、応用物理学会春季学術講演会; 10a-W810-9 (2019); 13a-A405-2(2020).
- [5] S. H. Lin, C. H. Chang, K. K. Liang, R. Chang, Y. J. Shiu, J. M. Zhang, T.-S. Yang M. Hayashi, F. C. Hsu, Adv. Chem. Phys., 121, 1 (2002).
- [6] J.R. Reimers, Journal of Chem. Phys., 115, 9103 (2001).