

# 非対称骨格／非対称置換型分子 Ph-BTBTT-C<sub>n</sub> の高移動度半導体特性

## High-Mobility Semiconductor Properties of Ph-BTBTT-C<sub>n</sub> Composed of Unsymmetric $\pi$ -Core and Unsymmetric Endcaps

産総研<sup>1</sup>, 東大院工<sup>2</sup>, 山形大工<sup>3</sup>

○東野 寿樹<sup>1</sup>, 荒井 俊人<sup>2</sup>, 井上 悟<sup>2</sup>, 松井 弘之<sup>3</sup>, 長谷川 達生<sup>2</sup>,

AIST<sup>1</sup>, Univ. of Tokyo<sup>2</sup>, Yamagata Univ.<sup>3</sup>

○Toshiki Higashino<sup>1</sup>, Shunto Arai<sup>2</sup>, Satoru Inoue<sup>2</sup>, Hiroyuki Matsui<sup>3</sup>, Tatsuo Hasegawa<sup>2</sup>

E-mail: t-higashino@aist.go.jp

塗布型有機半導体として、 $\pi$ 共役骨格にアルキル直鎖を導入することで溶解性・成膜性・半導体特性を改良した材料が広く用いられている。これまでに、ベンゾチエノベンゾチオフェン (BTBT) およびその拡張系  $\pi$  共役骨格の片側へのアルキル鎖の導入、ときにフェニル基を伴う非対称置換が、高性能な有機薄膜トランジスタ (TFT) の構築に理想的な、優れた層状結晶性の発現と深く関連する 2 分子膜型層状ヘリンボーン構造 (*b*-LHB) の形成を促すことが明らかになってきた[1]。この設計思想にもとづく分子の層状化効果は、層状結晶性を示さない拡張  $\pi$  共役骨格にも有効で、*b*-LHB 構造にもとづく優れた塗布成膜性と高い TFT 特性を与える[2]。われわれは、隣接分子が長軸方向に反平行に配列する非対称  $\pi$  共役骨格ベンゾチエノベンゾチオフェン (BTBT) に着目して[3]、フェニル／アルキル基を導入した **Ph-BTBTT-C10** を開発し、隣接分子と平行に配列することで *b*-LHB 構造を構築することで (図 a),  $10 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$  を超える移動度を示すことを見いだした。今回、そのキャリア輸送特性に焦点を当て、単結晶 TFT の角度依存測定と結晶構造にもとづく計算化学的手法を用いて、伝導特性の異方性について調べたので報告する。

単結晶 TFT は、パリレン C で表面を修飾した Si/SiO<sub>2</sub> 基板上に **Ph-BTBTT-C10** の 0.02 wt% アニソール溶液をドロップキャストして得られた薄片状結晶に、異なる方位に伝導チャネルを配置するようにソース／ドレイン金電極を真空蒸着することで作成した。各チャネルと結晶方位との関係は、X 線構造解析から得られた分子配列構造のなす角、結晶ファセットのなす角、および偏光顕微鏡観察によって決定した。測定したキャリア移動度の角度依存性は、*a* 軸 (HB の *slipped parallel* 接触と平行方向) に沿って最大となり、その移動度は  $12 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$  に達した (図 b)。この結果は、結晶構造にもとづいて計算されたバンド構造から見積もった正孔の有効質量の異方性 ( $m_x = 1.00 m_0$ ,  $m_y = 1.78 m_0$ ) と矛盾しない (図 c)。講演では、結晶構造、薄膜特性、トランスファー積分を踏まえ、構造-物性相関の詳細について議論する。

[1] a) S. Inoue *et al.*, *Chem. Mater.* **2015**, 27, 3809; b) H. Minemawari *et al.*, *Chem. Mater.* **2017**, 29, 1245. [2] T. Higashino *et al.*, *CrystEngComm* **2020**, 22, 3618. [3] Y. Dong *et al.*, *Org. Electron.* **2020**, 77, 105537.

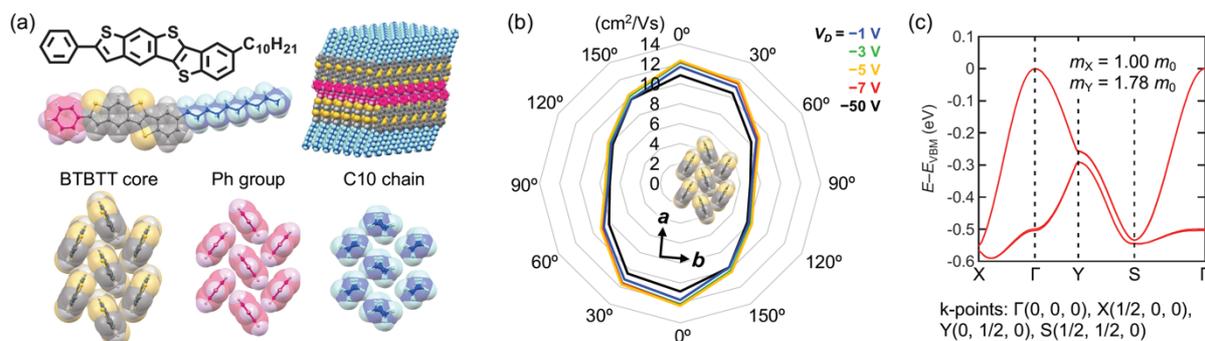


Figure (a) Molecular structure and crystal structures of **Ph-BTBTT-C10**. (b) Angular-dependent carrier mobility of the single-crystal TFT with (Inset) the corresponding crystal axes with the LHB packing of the BTBT core. (c) Valence band structure and effective masses along the crystal *a*\* ( $m_x$ ) and *b*\* ( $m_y$ ) axes.