

有機半導体の電荷輸送におけるポーラロンと動的構造揺らぎの影響

Role of Polaron and Dynamic Disorder on Charge Transport in Organic Semiconductors

筑波大数物¹, 千葉大院工², 千葉大 MCRC³,

○石井 宏幸¹, 吉田 弘幸^{2,3}, 小林 伸彦¹

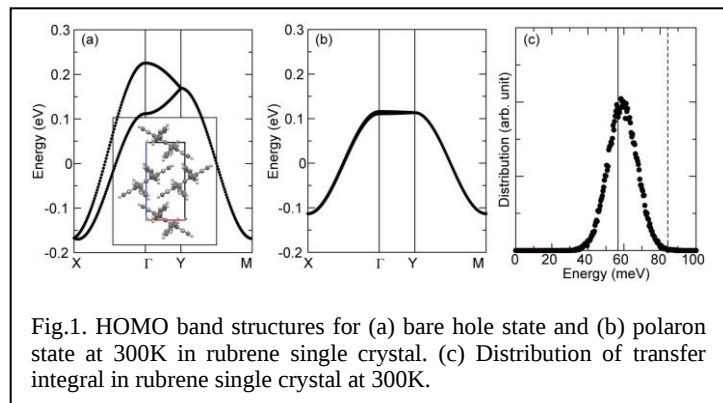
Univ. of Tsukuba¹, GSE Chiba Univ.², MCRC Chiba Univ.³,

°Hiroyuki Ishii¹, Hiroyuki Yoshida^{2,3}, Nobuhiko Kobayashi¹

E-mail: ishii@bk.tsukuba.ac.jp

有機半導体は低コストで軽量な半導体材料として注目され、IoT 社会の実現に欠かせないセンサや RF-ID タグなどへの応用研究が進んでいる。実用化には移動度の向上が共通する課題の一つとなっていて、材料開発には原子レベルからの電荷輸送機構の理解が必要不可欠である。これまで私たちは第一原理計算と連携させた「時間依存波束拡散法」を用いてペンタセンや BTBT、DNTT など代表的有機半導体の移動度を、定量的に評価・予測可能であることを報告してきた[1,2]。しかし移動度はバンド分散から得られる有効質量 m^* の逆数とキャリアの散乱時間 τ の積の形で与えられるので、移動度の大きさや温度依存性だけに注目しても、詳細な輸送機構を解明することは困難である。例えば移動度の温度変化の起源を、Hannewald らのポーラロンモデル[3]では、有効質量の温度変化で説明するのにに対し、Troisi らの動的構造揺らぎのモデル[4]では τ の温度変化として説明する。両モデルは室温近傍ではほぼ同じような移動度の温度依存性を与えるが、その微視的伝導機構は全く異なる。

本研究では、光電子分光や逆光電子分光測定[5]から得られるバンド分散にも注目し、上記のポーラロンと動的構造揺らぎの両方を統合・拡張したモデルを新たに開発した。これを基に時間依存波束拡散法で移動度の定量的評価を行った。一例として、ルブレ



単結晶の HOMO バンド分散と動的構造揺らぎの計算結果を図に示す。ポーラロン生成によりバンド幅だけでなく形状も大きく変調され、飛び移り積分の値もフォノンによって乱されている様子が分かる。本研究で採用したこの統合・拡張モデルは以前のモデル[1]と比較して、より多くの p 型材料や n 型材料における単結晶トランジスタ移動度の実験値を再現することを確認した。発表では計算方法やペンタセン、ルブレなどの計算結果を紹介し、その詳細について議論する。

[1] H. Ishii, *et al.*, Phys. Rev. B **98**, 235422 (2018). [2] H. Ishii, *et al.*, Sci. Rep. **10**, 2524 (2020). [3] K. Hannewald, *et al.*, Phys. Rev. B **69**, 075212 (2004). F. Ortmann, *et al.*, Phys. Rev. B **79**, 235206 (2009) [4] A. Troisi, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **96**, 086601 (2006). [5] H. Sato, H. Ishii, H. Yoshida, *et al.*, Nature Mat. (under review).