

有機半導体における電子と正孔の移動度の差とその微視的起源

Mobility Difference Between Electron and Hole in Organic Semiconductors and Its Microscopic Origin

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

最近の単結晶有機半導体の正孔移動度は室温で $10 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ を超え、安価で軽量・印刷可能な材料として注目されている。両極性半導体からなる EL や太陽電池、トランジスタのコンプリメンタリ回路には正孔移動度と同程度の電子移動度が求められるが、有機半導体の電子移動度は正孔に比べて一桁低い。これを改善する材料開発には電荷（電子・正孔）輸送機構の原子レベルでの微視的理解が必要不可欠である。

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、DNNT など代表的有機半導体の正孔移動度を、定量的に評価・予測する方法論を開発してきた[1,2]。前回の報告では、吉田ら（千葉大）によるペンタセン結晶の光電子分光および逆光電子分光による価電子バンドと伝導バンドを再現するように、これまで開発してきた「ポーラロンと動的乱れの統合理論モデル」を拡張・改良した。これを基にペンタセンの電荷輸送物性を調べたところ、正孔と異なり電子は低周波数の分子伸縮モードと強く結合するために、正孔に比べて電子移動度が一桁も減少することを示した[3]。

本発表では、電子輸送性（n 型）有機半導体として知られる PDI や NDI、さらに最近報告された BQQDI [4] などの電子輸送物性（ポーラロンバンドや動的乱れ）を調べ、これを DNBDT [5] などの高移動度な正孔輸送性（p 型）有機半導体の物性と系統的に比較することで（図 1 参照）、n 型有機半導体に共通する移動度低下の微視的要因などについて議論する。

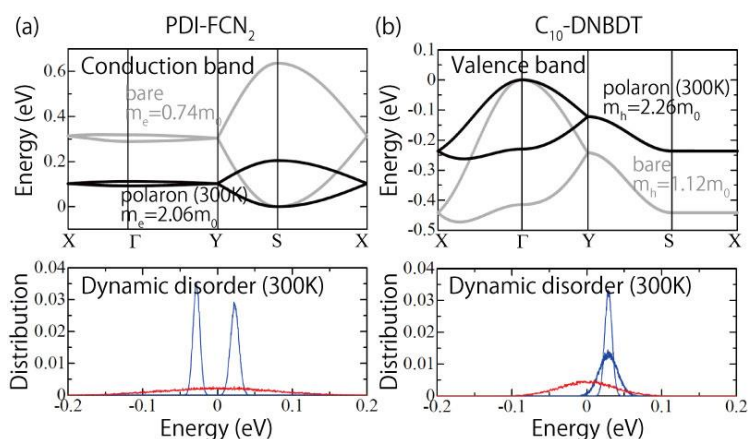


Fig. 1. (a) Calculated bare conduction band and polaron band (upper panel) for n-type PDI-FCN2 single crystal. Lower panel shows the probability distribution of transfer integrals (blue) and LUMO levels (red) at 300K. (b) Calculated results for p-type C10-DNBDT single crystal.

[1] H. Ishii, *et al.*, Phys. Rev. B **98**, 235422 (2018). [2] H. Ishii, *et al.*, Sci. Rep. **10**, 2524 (2020). [3] H. Sato, H. Ishii, H. Yoshida, *et al.*, Nature Mat. (Under review). [4] S. Kumagai, H. Ishii, T. Okamoto, *et al.*, Chem. Mater. **32**, 9115 (2020). [5] C. Mitsui, T. Okamoto, *et al.*, Adv. Mater. **26**, 4546 (2014).