

(ソニー(株)マテリアル研・融合領域研究部) 村上昌幸、大田陽介  
国清敏幸、 鵜川彰人

【序】電界効果トランジスタの能動チャンネル材料として有機物質を用いる研究が活発に行われるようになり、その材料開発には特に関心が集まっている。現在まで、単結晶試料においては  $10\text{cm}^2/\text{Vs}$  のオーダーの易動度が報告されるまでに至っているが[1]、薄膜プロセスで作製される有機トランジスタでは高々  $\sim 1\text{cm}^2/\text{Vs}$  のオーダーに留まっており、新たな物質系の開拓が切望されている。これまで、ペンタセンに代表されるアセン系物質が重点的に調べられてきたが、“キャリアのチャンネル”という見地からは、現在も盛んに研究が行われている有機導体の構成材料に関する豊富な研究結果が大いに役立つと考えられる。この観点から、我々はTTFやTTTに代表されるカルコゲン系有機材料について集中的に研究を進めている。今回、ペンタセンのπ電子系を6つの硫黄原子により拡張したヘキサチオペンタセン(HTP)を合成し、有機FETを作製して易動度を評価したところ、 $\mu = 1.3 \times 10^{-1} \text{cm}^2/\text{Vs}$  という良好な特性を示すことを見出した。この物質の合成、結晶構造、バンド構造、トランジスタ特性について報告する。

【方法】HTPの合成はGoodingsらの報告を参考にして行った[2]。得られたHTPは真空昇華により精製し、その純度は元素分析およびTOF-MSにより調べた。X線単結晶構造解析を行い、得られた構造を用いて第一原理計算によるバンド解析を行った[3]。FETデバイスは熱酸化処理したハイドロシリコン基板の上に金電極パターンを作成し、この上にHTPを真空蒸着するボトムコンタクト型で作製した。

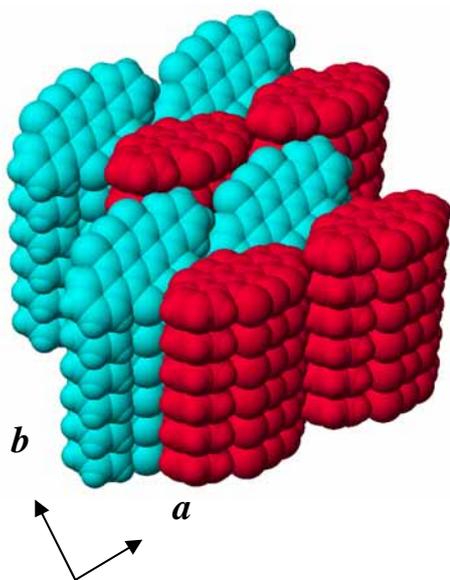


図1 . HTP の結晶構造

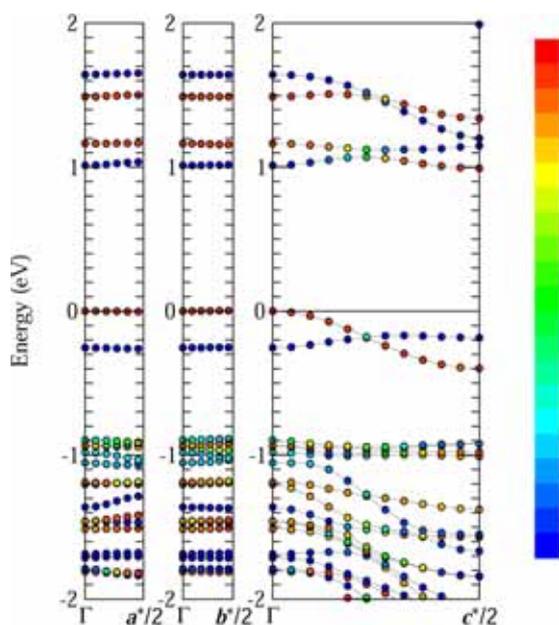


図2 . HTP のバンド構造

【結果と考察】結晶構造に関する報告が無かったので、単結晶構造解析を行った。その結果を図1に示す。 $c$ 軸に沿って2種類の独立なHTPがそれぞれカラムを形成している(図中、赤と青で示してある)。このカラム間には  $3.34\text{\AA}$ ,  $3.38\text{\AA}$ ,  $3.56\text{\AA}$  などの短い硫黄原子間のコンタクトが存在しており、結晶構造的には(110)面に平行な2次元的なバンドの存在が期待される。図2にHTPのバンド構造を、赤と青それぞれの分子からの寄与で階調表示したものを示す。これによると、カラム間の短い接触にも関わらず、赤のHTP分子と青のHTP分子間にはほとんど相互作用が無く、 $c$ 軸以外の方向の分散は極めて小さいことがわかる。さらに青のHTPカラムについては、それ自体の分散も小さい結果となっている。HOMOバンドの頂点付近における分散曲率から有効質量を見積もると  $m^*_{||c} = 2.5m_e$  となり、比較的キャリアが動きやすいバンド構造である。しかしながら、カルコゲン原子を導入した効果が十分に反映されているとはいえず、分子構造のデザインから結晶としての物性を設計することの困難さを窺わせる結果となった。

図3に、このHTPをチャンネルとして用いた有機トランジスタの  $I_d$ - $V_d$  特性を示す。このように典型的なp型半導体としてのFET動作曲線が観測されている。飽和領域から易動度を見積もると、 $\mu = 0.8 \times 10^{-1} \text{cm}^2/\text{Vs}$  という値が得られた。XRD測定から、HTPは基板に対して(110)面が平行となるように配向していることがわかった。電極との接触抵抗を評価するため、 $(I_d)^{-1}$ - $L_g$  特性を調べた結果を図4に示す。ゲート長  $L_g = 0$  の極限が接触抵抗を与えるから、図から  $R_c \sim 180\text{k}\Omega$  が得られる。また、接触抵抗を差し引いたintrinsic mobility  $\mu_i$  を評価してみたところ、 $\mu_i = 1.3 \times 10^{-1} \text{cm}^2/\text{Vs}$  となった。デバイスの表面形態をAFMにより観察したところ、HTP薄膜は  $\sim 100\text{nm}$  オーダーの小さいグレインにより構成されており、この結晶粒界による散乱を排除することができれば更なる易動度の向上も可能であろう。また、このHTPデバイスは大気中、 $100^\circ\text{C}$  に加熱しても特性が劣化しないという特徴をもつ。

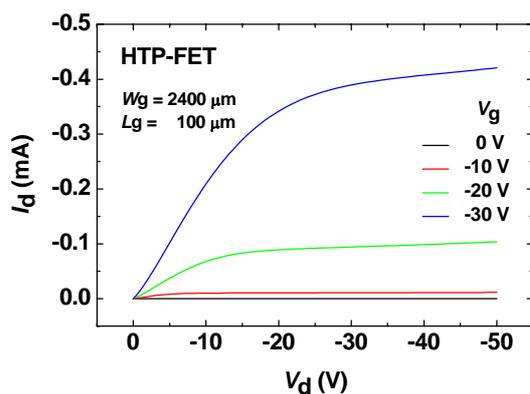


図3 . HTP-FETの  $I_d$ - $V_d$  特性

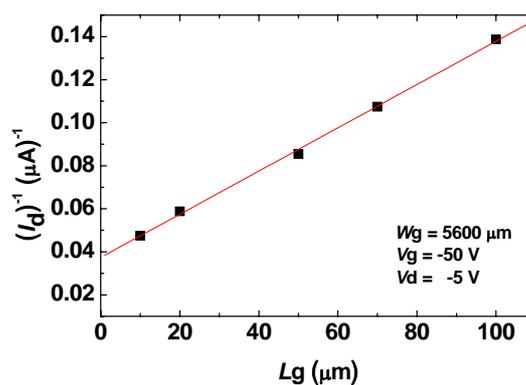


図4 . HTP-FETの  $(I_d)^{-1}$ - $L_g$  特性

文献 [1] V.C. Sunder *et al.*, Science **303**, 1644 (2004). [2] E.P. Goodings *et al.*, J. Chem. Soc. Perkin Trans. I, 1310 (1972). [3] G. Kresse *et al.*, Phys. Rev. **B47**, 558 (1993).