

(ソニー(株)マテリアル研・融合領域研究部) 国清敏幸、鵜川彰人

【序】近年、有機トランジスタに関する研究が盛んに行われてきており、その性能も実用化レベルまであと一歩というところまで到達している。現在、このトランジスタに用いるチャネル材料としては、ペンタセンとよばれる縮合芳香族化合物を用いた場合に最高の性能を示すことが報告されている [1]。バンド解析の結果から、この物質においては、杉綾模様の結晶構造に起因する 2 次元的な価電子帯が形成されていることがわかった。また、バンドの有効質量を求めると  $m^* \sim 2m_e$  前後の比較的軽い値となり、価電子帯にあるキャリアの運動に好ましい状態が実現されていることが明らかになった [2]。我々はこのペンタセンを凌ぐ半導体材料を開拓する目的で、分子内に多数のカルコゲン原子を持ち、等方的かつ強い分子間相互作用が期待できる結晶構造をとる幾つかの物質について第一原理計算によるバンド解析を行い、その半導体チャネル材料としての可能性について検討した。

【方法】バンド計算には、ウィーン大学のウルトラソフト擬ポテンシャル法による第一原理電子状態計算プログラム (VASP) を用い [3]、一般化勾配近似 (GGA) による密度汎関数法 (DFT) によるバンド解析を行った。

【結果と考察】ここでは、3 つの物質における結果について述べる。ヘキサチオペンタセン (HTP) は、Goodings らによって報告された物質であり [4]、ペンタセンの外周に 6 個の硫黄原子を配置した構造をもつ。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。HTP 分子は  $c$  軸に沿って 2 種類のカラムを形成している。このカラム間には、硫黄原子を通じた相互作用が期待されるが、図 2 に示したように、 $c$  軸以外の方向の分散は極めて小さく、この物質が 1 次元的事であることがわかる。

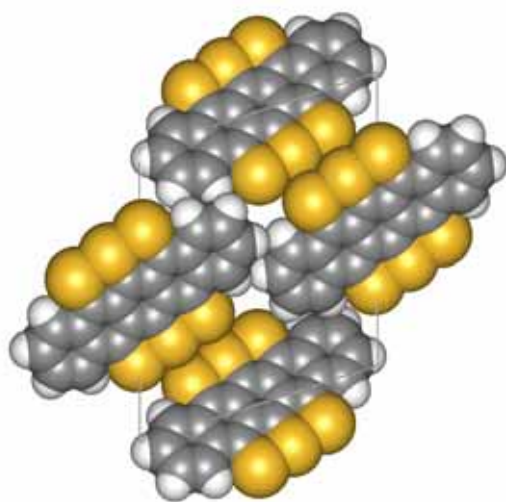


図 1 . HTP の結晶構造 ( $c$  軸投影図)

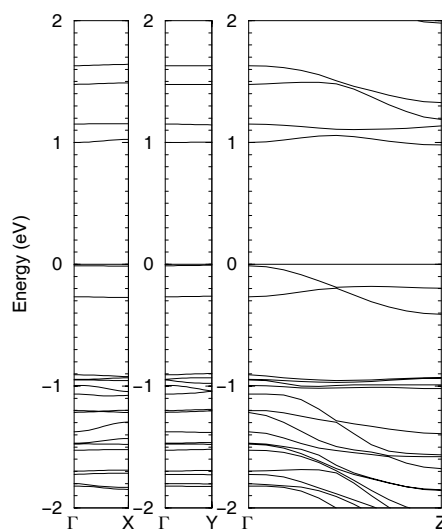


図 2 . HTP のバンド構造

この材料を用いてFETを試作して易動度を評価したところ、 $1.3 \times 10^{-1} \text{cm}^2/\text{Vs}$ という良好な特性が得られた。FETの作製方法、各種のパラメータ等の詳細は別講演(1A13)で発表する。

次に、BMDT-TTFのバンド構造について述べる。図3はHOMOバンドのトップから0.05eVだけ低いところで切った等エネルギー面である。このように、分子のスタック軸である $a$ 軸方向に最も大きい分散があり、また、分子の横方向である $c$ 軸方向にも硫黄原子を介した相互作用が存在するため、等エネルギー面は擬2次元的となっている。 $a$ 軸に沿った方向の有効質量は $m^*_{\parallel a} = 1.0 m_e$ と求まり、この物質はペンタセンを凌ぐ輸送特性を出し得る材料である。実際にウェットプロセスによりFETを試作してみたところ、ゲート変調が確認できた。現在、プロセスを改良して性能向上を試みている。

最後に、 $\text{C}_9\text{S}_9$ で表される材料について述べる。この物質はBrownらによって報告された物質で[5]、分子の外周がすべて硫黄原子で覆われているという特徴をもつ。そのため、2次元、3次元的な分子間相互作用が期待されたが、実際の計算結果は正にそれを裏付けるものである。BMDT-TTFの場合と同様に、HOMOバンドのトップから0.05eV低いところで等エネルギー面を描くと図4のように球状となり、等方的な3次元バンドをもっていることがわかる。この物質の結晶的な特徴として、 $\text{C}_9\text{S}_9$ 分子が面内で最密充填し、これが積層する構造となっている。分子面内方向の有効質量は $m^*_{\parallel} = 0.68m_e$ 、また、面間方向では $m^*_{\perp} = 0.85m_e$ といずれも非常に軽い値となり、キャリアの伝導には極めて好適である結果となった。唯一、この物質はそのイオン化ポテンシャルの値が非常に大きいため、電極から結晶のHOMOバンドにキャリアを注入することが困難であると予想される。

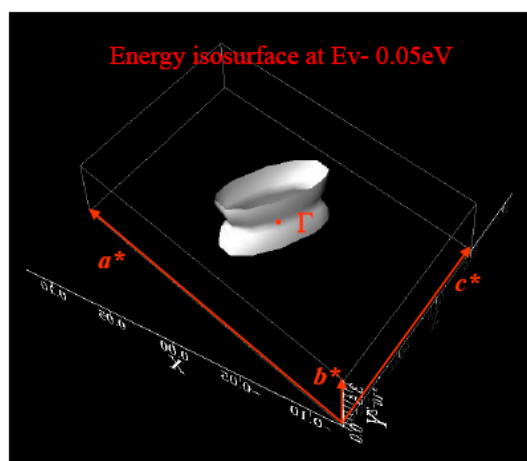


図3. BMDT-TTFの等エネルギー面

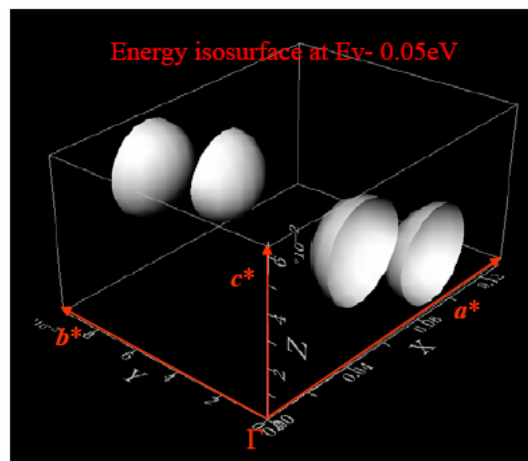


図4.  $\text{C}_9\text{S}_9$ の等エネルギー面

文献 [1] H. Klauk *et al.*, J. Appl. Phys. **92**, 5259 (2002). [2] M.L. Tiago *et al.*, Phys. Rev. **B67**, 115212 (2003); 国清ら、未発表. [3] G. Kresse *et al.*, Phys. Rev. **B47**, 558 (1993); *ibid.*, **B54**, 11169 (1996); Comput. Mat. Sci. **6**, 15 (1996); J. Phys. Cond. Mat. **6**, 8245 (1994). [4] E.P. Goodings *et al.*, J. Chem. Soc. Perkin Trans. I, 1310 (1972). [5] J.P. Brown *et al.*, *ibid.*, 866 (1974).