

# 高圧下における有機半導体の伝導性と結晶構造の関係

大阪大学 産業科学研究所 岡田悠悟

目的: 有機半導体の伝導性は、 $\pi$ 共役系有機分子間の $\pi$ 軌道のオーバーラップ(～トランスファー積分 $t$ )に依存するため、有機半導体は結晶格子の変化に敏感に応答する物質群である。本研究では、有機半導体の伝導性を決定するメカニズムの指針を得るため、外部圧力印加による分子間距離の収縮を通して、有機半導体の輸送特性と結晶構造の関係を調査した。

内容: 高移動度の有機半導体(ルブレン、ペンタセン、DNNT)に電界効果によってキャリアを注入し、静水圧を印加して伝導性を測定した。輸送特性に対する結晶構造の寄与を調べるため、高圧下粉末X線構造解析を行い、加圧状態の格子定数を決定した。得られた格子定数を常圧における既知の結晶構造に当てはめ、Gaussian03を用いて構造最適化を行い、各圧力におけるトランスファー積分を計算した。

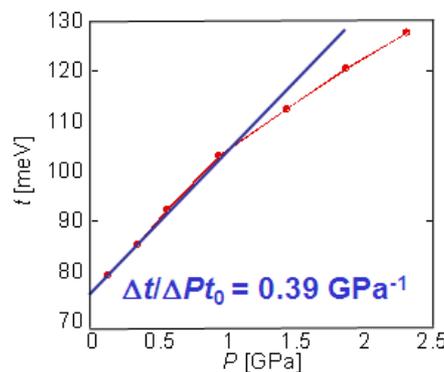
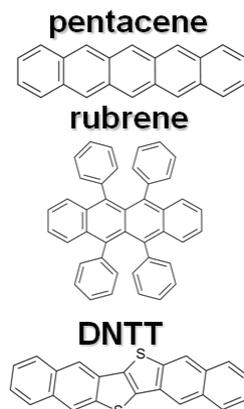
結果: 計算結果は加圧に伴う移動度の増加を結晶軸異方性も含めてよく再現した。また、有機半導体では加圧による分子間距離の収縮だけでなく、分子配向の回転による隣接分子間の $\pi$ 軌道のオーバーラップの変化も伝導性に大きく寄与する事を見出した。

利用した計算機: SX-8R

CPU時間: 1回1時間

使用メモリ: 16 GB

並列化: 4コア



左図: 有機半導体分子  
右図: トランスファー積分  
の圧力依存性