

# カルコゲノフェン系新規有機半導体材料の第一原理計算

筑波大学数理物質科学研究科<sup>A</sup> 九州大学稲盛フロンティア研究センター<sup>B</sup>  
前田崇博<sup>A</sup>, 佐藤駿介<sup>A</sup>, 石井宏幸<sup>A</sup>, 小林伸彦<sup>A</sup>, ヤンユソク<sup>B</sup>, 安田琢磨<sup>B</sup>

## First-principles calculations for the novel organic semiconductors substituted with chalcogen atoms

<sup>A</sup>University of Tsukuba, <sup>B</sup>Kyushu University

T. Maeda<sup>A</sup>, S. Sato<sup>A</sup>, H. Ishii<sup>A</sup>, N. Kobayashi<sup>A</sup>, Y. S. Yang<sup>B</sup>, T. Yasuda<sup>B</sup>

ペンタセンやルブレンを代表とする高性能な単結晶有機半導体はアモルファスシリコンに匹敵する移動度を有することが分かり注目されている。分子骨格に硫黄原子が入ったチオフェン類は分子間の硫黄原子の相互作用が強いため、 $\pi$ 電子が強められるという特徴がある。例えば、チオフェン類材料である DNTT[1] と DTT-8[2] を用いたトランジスタの移動度はそれぞれ  $2.0\text{cm}^2/\text{Vs}$ 、 $10.2\text{cm}^2/\text{Vs}$  という高い値が得られたことが報告された。

本研究では新規有機半導体である DBTT8 等のカルコゲノフェン系材料の電子状態計算を行った。また、有効質量や飛び移り積分といった物性値を明らかにし、伝導特性に関して議論を行う。

## 参考文献

- [1] T. Yamamoto and K. Takimiya, *J. Am. Chem. Soc.* **129**, 2224 (2007)
- [2] Y. S. Yang, T. Yasuda, H. Kakizoe, H. Mieno, H. Kino, Y. Tateyama and C. Adachi, *Chem. Commun.* **49**, 6483-6485 (2013)