

テトラアリアルテトラチエニレン誘導体の分子集合体構造と物性に対する置換基効果

(東北大工¹・東北大院工²・東北大多元研³) ○齋藤元輝¹・武田貴志^{2,3}・芥川智行^{2,3}
 Substituent Effect of Molecular Assembly Structure and Physical Properties in Tetraaryltetrathienylene Derivatives. (¹*School of Engineering, Tohoku University*, ²*Graduate School of Engineering, Tohoku University*, ³*IMRAM, Tohoku University*) ○Genki Saito,¹ Takashi Takeda,^{2,3} Tomoyuki Akutagawa^{2,3}

Tetrathienylene has a non-planar π conjugated system derived from cyclooctatetraene (COT). COT features a bent tub-structure and its inversion, which has been applied to develop unique functional materials. In this work, we newly synthesized tetra[2,3]thienylene (**1**) and tetra[3,4]thienylene (**2**) derivatives, where their π -electron systems were expanded by introduction of aryl/arylethynyl groups. These structural isomers showed different photochemical properties, which indicated different electron states. The electrochemical properties and molecular assemblies of **1** and **2** will be presented.

Keywords : Tetrathienylene, Structural isomer, Molecular assembly, Electronic state

テトラチエニレンは、シクロオクタテトラエン(COT)に由来する非平面の π 共役電子系を有する化合物である。COTの分子構造は折れ曲がった tub 型構造であり、環反転運動を示すことが知られている。この分子構造と環反転運動が関連したユニークな物性の発現が期待される¹。テトラチエニレンには構造異性体が存在し、適切な置換基の導入により異なる機能発現が期待できる。我々はこれまでにテトラ[2,3]チエニレンおよびテトラ[3,4]チエニレンにカルボキシル基を導入した化合物を合成し、それらが異なる分子集合体を形成する事を見出している^{1,2}。

本研究では、テトラチエニレンの π 電子拡張および構造異性体間の物性変化を探索することを目的とし、末端にアリアル基およびアリアルエチニル基を有するテトラ[2,3]チエニレン(**1a**, **b**)およびテトラ[3,4]チエニレン(**2a**, **b**)を新規に合成した。溶液中の UV-Vis スペクトル測定から、構造異性体間で電子状態に大きな違いがあることを見出した(図1)。現在、構造異性体 **1**、**2** の光学および電気化学的特性に加え、分子集合体構造について評価を行っている。これらの詳細を報告する。

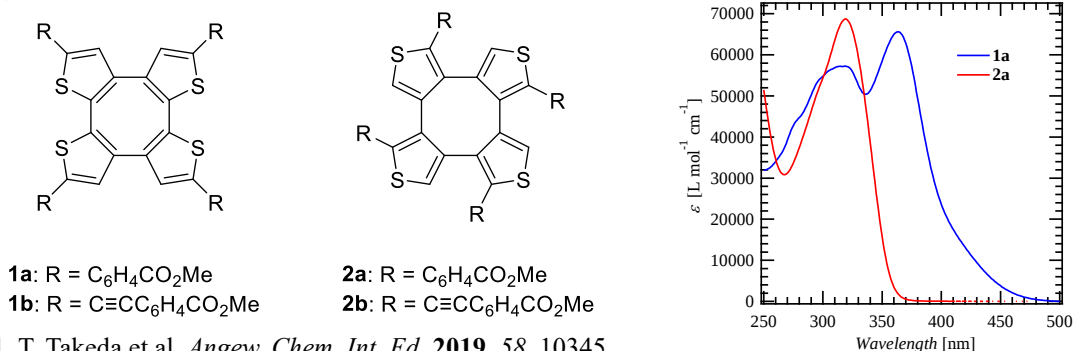


図 1. **1a** と **2a** の UV-Vis スペクトル

1. T. Takeda et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, 58, 10345.

2. T. Takeda et al. *Cryst. Growth Des.* **2019**, 19, 4784.