

ジチエノベンゾチアゾールを基盤とした有機半導体の開発 : 設計, 合成, および電荷輸送特性

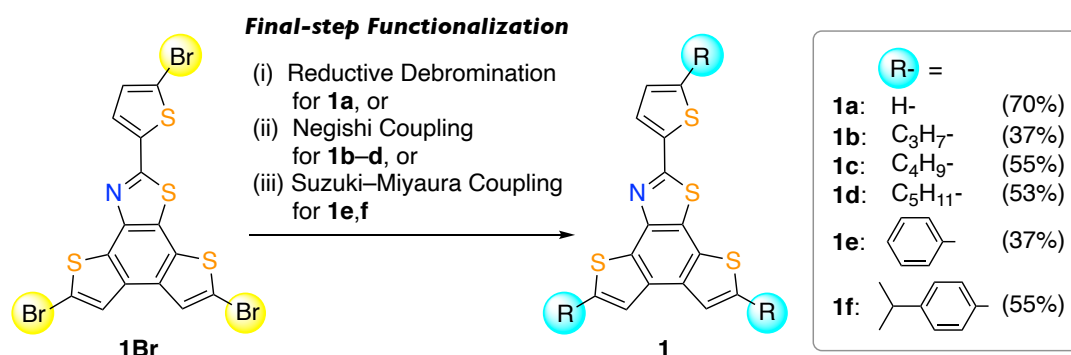
(阪府大院工¹・阪府大 RIMED²・阪府大院理³・リガク⁴) 大垣拓也^{1,2}・岡本温貴¹・服部励太郎¹・中畔慶人³・佐藤寛泰⁴・松井康哲^{1,2}・太田英輔^{1,2}・麻田俊雄^{2,3}・内藤裕義^{1,2}・○池田 浩^{1,2}

Development of Dithienobenzothiazole-based Organic Semiconductors: Design, Synthesis, and Charge-Transport Properties (¹ Grad. Sch. Eng., Osaka Pref. Univ., ² RIMED, Osaka Pref. Univ., ³ Grad. Sch. Sci., Osaka Pref. Univ., ⁴ Rigaku) Takuya Ogaki,^{1,2} Haruki Okamoto,¹ Reitaro Hattori,¹ Keijin Nakaguro,³ Hiroyasu Sato,⁴ Yasunori Matsui,^{1,2} Eisuke Ohta,^{1,2} Toshio Asada,^{2,3} Hiroyoshi Naito,^{1,2} ○Hiroshi Ikeda^{1,2}

In organic semiconductors used for organic field-effect transistor (OFET), substituents affect the properties of materials, such as solubilities and hole mobilities. For this reason, it is required to prepare many derivatives efficiently. In this work, we designed dithienobenzothiazole (**1**, Scheme) by using machine learning. We also developed a divergent synthetic route *via* a common precursor **1Br**, which enables various molecular modification of **1** at the final step. The alkylated derivatives **1b–d** with high solubilities can be applied to the solution-processed OFET by spin coating. In the presentation, we will discuss crystal structures and characteristics of the OFET of **1**.

Keywords : Organic Semiconductors; Machine Learning; Organic Field-effect Transistors; Charge Transport; Crystal Structure

有機電界効果トランジスタ (OFET) に用いられる有機半導体において、置換基は溶解性や正孔移動度などの材料特性に大きな影響を与えるため、材料の効率的な置換基修飾が求められる。そこで本研究では、ジチエノベンゾチアゾール誘導体 (**1**, Scheme) を機械学習の結果を基に設計し、最終合成段階で **1** の様々な分子修飾が可能となるダイバージェント合成経路を開発した。即ち、種々のアルキルおよびアリール誘導体 **1b–f** の合成を、トリブロモ前駆体 **1Br** を共通の合成中間体として好収率で達成した。また、**1b–d** はトルエンに容易に溶解し、塗布法により OFET を作製できた。発表では **1** の結晶構造と OFET の特性評価についても議論する。



Scheme. Synthetic route for **1a–f** via the final-step functionalization of **1Br**.