

ヘキサアリールベンゼンを用いた分離積層構造を有する電荷移動錯体結晶の作製

(北大院工¹・北大 WPI-ICReDD²) ○安藤 廉平¹、陳 旻究^{1,2}、伊藤 肇^{1,2}

Synthesis of charge transfer crystal with segregated packing structure using hexaarylbenzene (¹Graduate School of Engineering, Hokkaido University, ²WPI-ICReDD, Hokkaido University)
○Rempei Ando,¹ Mingoo Jin,^{1,2} Hajime Ito^{1,2}

Charge transfer crystals (CT crystals) are formed by electronical donor and acceptor molecules. CT crystals can be classified into two types according to their crystal packing manner. One is the mixed stack in which donor and acceptor molecules are alternately stacking, and the other is the segregated stack in which donor and acceptor molecules are stacked each other. Segregated stack is known to exhibit good electron conductivity, but there are few reports about segregated stack. In this study, we report a new CT crystal with segregated stack by using hexa(2-pyridyl)benzene (HPyB) as a donor molecule and 7,7,8,8-tetracyanoquinodimethane (TCNQ) as an acceptor molecule. CT crystal was obtained by slow evaporation from a chloroform solution. The color of CT crystal was dark blue, and single crystal X-ray diffraction (SC-XRD) revealed that the CT crystal was composed of two independent HPyB and four TCNQ. The packing structure was segregated stack which each HPyB and TCNQ are stacked alone the c-axis, and distances between each molecule were 3.4–3.5 Å for HPyB and 3.2–3.4 Å for TCNQ. The electron conductivity of CT crystal will be presented.

Keywords : organic cocrystal, charge transfer crystal

電荷移動錯体結晶 (CT 結晶) とはドナー分子及びアクセプター分子から形成される結晶である。CT 結晶はその結晶パッキングによって二つに分類することができる。一つはドナー分子及びアクセプター分子が交互に積み重なった交互積層構造、もう一つはドナー分子同士、アクセプター分子同士が積層した分離積層構造である¹⁾。このうち、分離積層構造は高い導電性を示すことが知られているが、このような構造を示す CT 結晶の報告例は少ない。本研究ではドナー分子にヘキサ(2-ピリジル)ベンゼン (HPyB) をアクセプター分子に 7,7,8,8-テトラシアノキノジメタン (TCNQ) を用いることで分離積層構造の CT 結晶を得ることに成功した。結晶は HPyB 及び TNCQ を同当量、クロロホルム溶液をゆっくり蒸発させることで得られた。結晶の色は濃青色で、その単結晶 X 線構造解析を行ったところ、CT 結晶は独立した HPyB 2 分子と TCNQ 4 分子から構成されていることがわかった。また、パッキング構造は HPyB, TCNQ 同士が c 軸に沿って積層した分離積層構造をとっており、その距離は HPyB では 3.4–3.5 Å, TCNQ では 3.2–3.4 Å であった。本発表では、この結晶が示す電気伝導性も踏まえて紹介する。

1) Sun, L.; Wang, Y.; Yang, F.; Zhang, X.; Hu, W. *Adv. Mater.* **2019**, *31*, 22.

