

## β 位にメチルカルコゲノ基を有するテトラチエノアセン誘導体の結晶構造と分子間相互作用

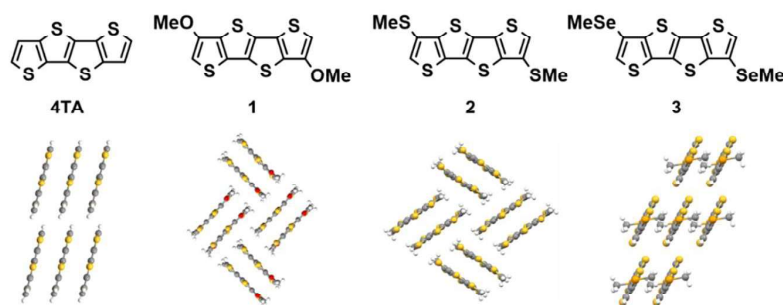
(東北大院理<sup>1</sup>・理研 CEMS<sup>2</sup>) ○金澤 輝石<sup>1,2</sup>・川畑 公輔<sup>1,2</sup>・瀧宮 和男<sup>1,2</sup>

Intermolecular Interaction in the Crystal Structure of β-Methylchalcogenated Tetrathienoacenes (<sup>1</sup>*Graduate School of Science, Tohoku University*, <sup>2</sup>*RIKEN CEMS*) ○Kiseki Kanazawa,<sup>1,2</sup> Kohsuke Kawabata,<sup>1,2</sup> Kazuo Takimiya,<sup>1,2</sup>

Control/prediction of crystal structures of organic semiconductors is very important, though it is still challenging owing to the complicated interplay of various intermolecular interactions. Recently, we have reported that β-methylchalcogenation of a series of linear acenedithiophenes alters crystal structures from the herringbone to the rubrene-like pitched π-stack. In this study, to understand the effects of β-methylchalcogenation on tetrathienoacene (4TA) that affords one-dimensional π-stack structure, we have synthesized β-methylchalcogenated-4TA and elucidated their crystal structures and then intermolecular interactions in the solid state. As a result, the crystal structures of 4TA derivatives turned out to be changed significantly, which can be understood by the analysis of intermolecular interactions; interplay between the CH-π interactions induced by methylchalcogenation and the inherent nature of π-π interactions of 4TA cores preserved has the key role in determination the crystal structures of 4TA derivatives. *Keywords* : Organic semiconductor, Crystal structure, Intermolecular interaction, Thienoacene

有機半導体材料の開発において、結晶構造の制御と予測は重要な課題である。最近我々は、ヘリンボーン構造を形成するアセンジチオフェンのβ位にメチルチオ基を導入することで、結晶構造がルブレン様の傾斜型積層構造に変化することを報告した<sup>1)</sup>。

本研究では、一次元 π 積層構造を形成するテトラチエノアセン (4TA) における β 位メチルカルコゲノ基置換の結晶構造への影響を調査するために、化合物 **1-3** を合成し (下図)、単結晶 X 線構造解析と SAPT 法による分子間相互作用の解析をおこなった。構造解析により、メトキシ体 (**1**) とメチルチオ体 (**2**) で結晶構造に大きな変化が見られた。また分子間相互作用の解析から、置換基により誘起された相互作用が結晶構造の変化を促す一方、4TA 骨格自体がもつ π 積層構造を形成する傾向の影響が大きいことも明らかになった。



1) C. Wang *et al.*, *Chem. Sci.*, **2020**, *11*, 1573-1580.