

ビラジカル性を制御したベンゾ縮環型キノイドオリゴチオフェンの合成と物性

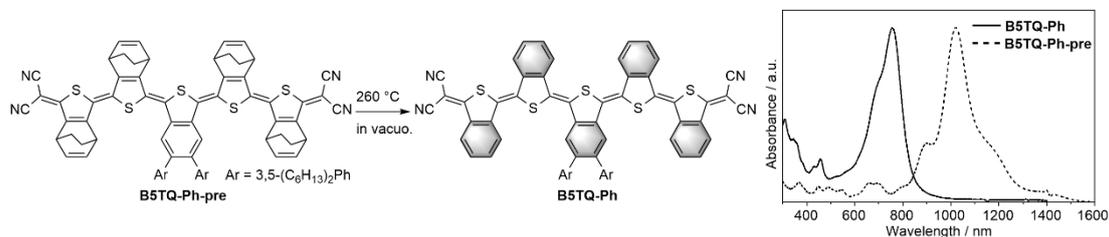
(阪大産研) ○山本 恵太郎・家 裕隆

Synthesis and Properties of Quinoidal Oligothiophenes Having Benzo-Annulation for Controlling Biradical Character (*ISIR, Osaka University*) ○Keitaro Yamamoto, Yutaka Ie

Quinoidal oligothiophenes are promising candidates for organic semiconducting materials owing to their unique electronic states. Quinoidal oligothiophenes have a resonance of quinoidal/biradical in the ground state, which is stemmed from aromatization of each thiophene ring. In our previous study, we developed several quinoidal oligothiophenes having benzo-annulation and revealed the influence of the benzo-annulation on the biradical character. In this study, we report on quinoidal thiophene 5-mer having fully benzo-annulation in the thiophene rings. UV-vis-NIR absorption spectrum of this molecule in solution showed a large blue shift compared to that of partially benzo-annulated compound. Synthesis and detailed properties of these molecules will be reported.

Keywords : Quinoidal Oligothiophene; Biradical Character; Benzo-Annulation

キノイド構造の π 共役分子は有機半導体材料への応用が期待されている。キノイドオリゴチオフェンは、チオフェン環の芳香族化が駆動力となることで、基底状態においてキノイドとビラジカルの共鳴構造をとる。我々はこれまでに、ベンゾ縮環構造を導入したキノイドチオフェン3量体を開発し、ベンゾ縮環導入がキノイド構造の電子状態制御に有効であることを明らかにしている^{1,2)}。そこで本研究では、より高いビラジカル性をもつキノイドチオフェン5量体に対して、全てのチオフェン環にベンゾ縮環を導入した **B5TQ-Ph** を設計した。**B5TQ-Ph** は、前駆体 **B5TQ-Ph-pre** からの熱変換逆 Diels-Alder 反応を鍵とするルートによって合成を行った。**B5TQ-Ph** は溶液中における紫外可視近赤外吸収スペクトル測定において、**B5TQ-Ph-pre** より吸収極大が 270 nm 短波長シフトした。これはビラジカル性の減少に起因するものと考えられる。本発表では、ベンゾ縮環の数と位置が異なるキノイドチオフェン5量体の合成と物性についても併せて報告し、分子構造と電子状態の相関を詳細に議論する。



- 1) Yamamoto, K.; Ie, Y.; Nitani, M.; Tohnai, N.; Kakiuchi, F.; Zhang, K.; Pisula, W.; Asadi, K.; Blom, P. W. M.; Aso, Y. *J. Mater. Chem. C* **2018**, *6*, 7493.
- 2) Yamamoto, K.; Jinnai, S.; Takehara, T.; Suzuki, T.; Ie, Y. *Org. Lett.* **2020**, *22*, 547.