

置換ナフトビスチアジアゾールを含む電子受容性分子の合成と有機太陽電池アクセプターへの応用

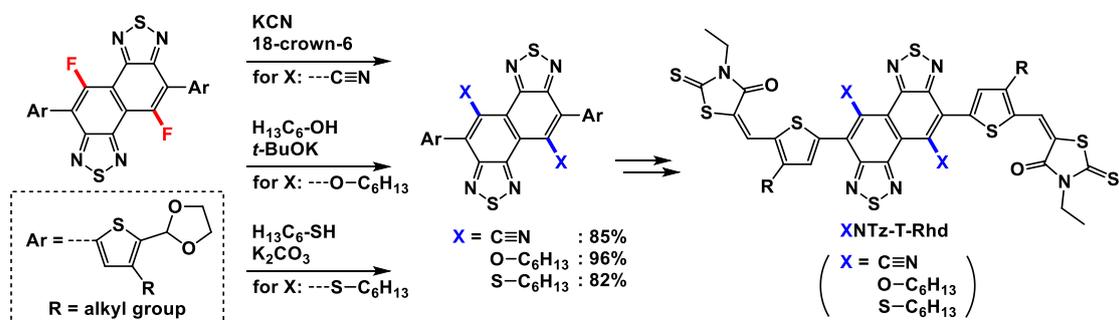
(阪大産研) ○大井 彩裕美・瀬尾 卓司・陣内 青萌・家 裕隆

Synthesis of Electron-Accepting Molecules Containing Substituted Naphthobisthiadiazole and Their Application to Acceptors in Organic Photovoltaics (*The Institute of Scientific and Industrial Research, Osaka University*) ○Ayumi Oi, Takuji Seo, Seihou Jinnai, Yutaka, Ie

Naphthobisthiadiazole (NTz) is one of the promising electron-accepting unit for acceptor and donor materials in organic photovoltaics (OPVs). Here, we present the synthesis, properties, and OPV performances of NTz-based acceptor materials, which possess cyano, alkoxy, and alkylthio group in the NTz unit. These target molecules were obtained by nucleophilic substitution reactions of fluorinated NTz derivatives. OPV devices based on poly(3-hexylthiophene) and alkylthio-substituted molecule showed good power conversion efficiency. **Keywords** : Organic Photovoltaics; Non-Fullerene Acceptors; n-type Organic Semiconductor; π -Conjugated Compound; Organic Electronics

ナフトビスチアジアゾール (NTz) は良好な電子受容特性を有する π 共役化合物であり、有機太陽電池 (OPV) のドナー材料やアクセプター材料における電子受容性ユニットとして有望視されている。当研究室では NTz ユニットにフッ素原子を導入したフッ素化ナフトビスチアジアゾール (FNTz) の合成に成功し、これをアクセプター材料に利用した有機太陽電池素子が良好な特性を示すことを報告した¹⁾。本研究では FNTz のフッ素原子を脱離基とする芳香族求核置換反応を検討し、シアノ基やアルコキシ基、スルファニル基を有するナフトビスチアジアゾール誘導体の合成と、これを電子受容性ユニットとするアクセプター材料の特性について検証を行った。

FNTz 誘導体の芳香族求核置換反応は下記スキームに示した反応により達成した。得られた誘導体に 2-ethylrhodanine を末端基として導入したアクセプター材料 (XNTz-T-Rhd) を合成した。最低空軌道 (LUMO) 準位をサイクリックボルタンメトリー測定により見積もった結果、LUMO 準位はそれぞれ -3.82 eV (X: CN)、 -3.53 eV (X: O-C₆H₁₃)、 -3.52 eV (X: S-C₆H₁₃) であり、良好な電子受容性を有していることが示唆された。これらのアクセプター材料と、代表的なドナー材料である poly(3-hexylthiophene) (P3HT) を使用して OPV 素子を作製し、その特性を評価したところスルファニル基を導入したアクセプター材料 (HexSNTz-T-Rhd) で良好な発電効率が観測された。



1) Chatterjee, S.; Ie, Y.; Moriyama, T.; Blom, P. W. M. Y. Aso, Y.; et al. *NPG Asia Mater.* **2018**, *10*, 1016.