

ドーブ型 PEDOT の単分子量オリゴマーモデルにおける新規プロピレンジオキシチオフエニットの導入効果

(東京大学物性研究所) ○後藤 将夫・藤野 智子・小野塚 洸太・森 初果

Effects of propylenedioxythiophene units incorporated into single-molecular-weight oligomer conductors that model doped PEDOT (¹*The Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo*) ○Masao Goto, Tomoko Fujino, Kota Onozuka, Hatsumi Mori

Conductive polymers such as doped poly(3,4-ethylenedioxythiophene) (PEDOT) are widely used for organic electronic device technologies. However, it is difficult to prepare single crystals of polymers due to their molecular-weight distribution that hinders the detailed structural analysis of conductive polymers. From this reason, it is hard to elucidate their conduction mechanism and to design organic conductive materials based on the mechanism. One promising approach to this problem is to develop single-crystalline and single-molecular-weight oligomer-based conductors that model doped PEDOT. We previously reported that the dimer charge transfer salts of EDOT (**2O**•X) showed large bandwidths (~1 eV), exhibiting a widely ranged conductivity depending on their counter anions. In this study, we synthesized new dimer charge transfer salts based on 3,4-propylenedioxythiophene (**2P**^H•X), and clarified the effects on the structure and physical properties based on the structural perturbation induced by the new unit.

Keywords : Charge Transfer Salt; Oligothiophene; Molecular crystal; Electrical Conductivity; Radical Cation

ドーブ型ポリ (3,4-エチレンジオキシチオフエン) (PEDOT) に代表される導電性高分子は有機エレクトロニクスデバイスに広く応用されている。しかしながら、高分子は広い分子量分布を有するため単結晶の作製は困難である。そのため、固体中の詳細な構造を得ることが難しく、伝導機構の解明と機構に基づいた材料設計は困難である。この問題に対する有望なアプローチとして、我々はドーブ型 PEDOT をモデルとした単結晶性の単分子量オリゴマー型伝導体の開発を進めている。これまでに、EDOT の 2 量体電荷移動塩 (**2O**•X, 図 1) ^{1,2} が分子性導体・超伝導のバンド幅に匹敵する大きなバンド幅 (~1 eV) を有し、対アニオンに依存した幅広い伝導性を示すことを報告している。本研究では、前述の **2O**•X と異なる結晶構造の発現を狙い 3,4-propylenedioxythiophene の 2 量体電荷移動塩 (**2P**^H•X) の合成を行い、新規ユニットの導入がもたらす構造・物性への影響について検討した。

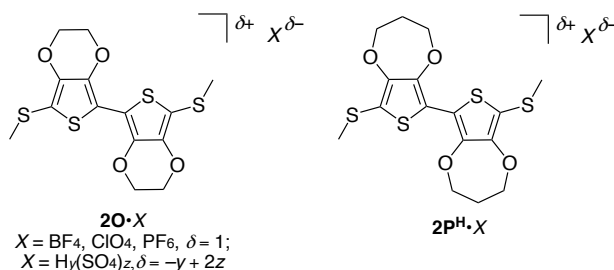


図 1. **2O**•X と **2P**^H•X の構造

1) Kameyama, R.; Fujino, T.*; Dekura, S.; Kawamura, M.; Ozaki, T.; Mori, H.* *Chem. Eur. J.* **2021**, 27, 6696–6700. Front Cover. 2) Kameyama, R.; Fujino, T.*; Dekura, S.; Imajo, S.; Miyamoto, T.; Okamoto, H.; Mori, H.* *J. Mater. Chem. C*, **2022**, 10, 7543–7551.