

## π拡張縮環構造をホッピングサイトとする長鎖分子ワイヤの開発

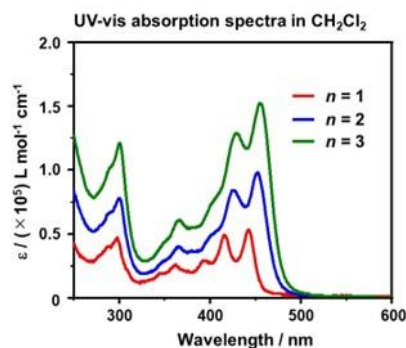
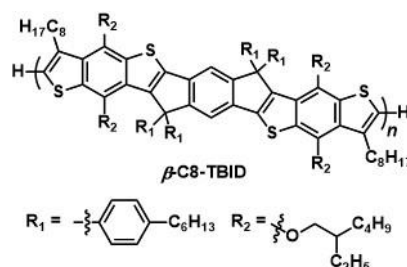
(阪大産研<sup>1</sup>・阪大 ICS-OTRI<sup>2</sup>) ○浅川 亮<sup>1</sup>・横山 創一<sup>1,2</sup>・家 裕隆<sup>1,2</sup>

Development of Long Molecular Wires Based on π-Extended Fused Ring Structure as a Hopping Site (<sup>1</sup>SANKEN, Osaka University, <sup>2</sup>ICS-OTRI, Osaka University) ○Ryo Asakawa,<sup>1</sup> Soichi Yokoyama,<sup>1,2</sup> Yutaka Ie<sup>1,2</sup>

Toward the development of molecular wires bearing high hopping-transport conductance, equalizing the energy levels of their hopping sites is one of the promising strategies. Utilization of π-extended fused ring structure is an effective approach to lower the reorganization energy. In this work, we designed and synthesized a π-extended fused ring **β-C8-TBID** as a hopping site. To construct localized conjugation in the **β-C8-TBID**-repeated oligomers, we decided to utilize head-to-head twisted structure and thus introduced *n*-octyl chains at the terminal β-positions of the molecule. Furthermore, oligomerization of **β-C8-TBID** was conducted, and their photophysical and electrochemical properties were investigated. In the UV-vis absorption spectra, these oligomers showed almost same maximum absorption wavelengths, indicating that the conjugation was localized on the **β-C8-TBID** fragment.

**Keywords** : Molecular Wire; Hopping Conductance; π-Extended Fused Ring Structure; Single-Molecule Conductance; Molecular Electronics

単分子素子の実現に向けて高い単分子電気伝導度を示す分子の開発が重要である。短い鎖長の分子内電気伝導はトンネル伝導機構である一方で、数ナノメートル以上に伸長した長鎖分子では、分子内の局在化した電子準位である“ホッピングサイト”を電荷が飛び移るホッピング伝導機構を示すことが知られている<sup>1)</sup>。当研究室では、オリゴチオフェンの有効共役長を制限し、ホッピングサイトを均質化することで単分子電気伝導度が向上することを明らかにした<sup>2)</sup>。しかし、オリゴチオフェンの柔軟な構造によって生じる大きなエネルギー損失が依然として問題である。そこで本研究では、熱的なエネルギー損失の低減を目指して、ホッピングサイトに剛直な縮環構造を用い、さらに有効共役長を一定にした分子の開発を行った。開発した**β-C8-TBID**は1-3量体へと鎖長伸長することによってモル吸光係数が増加する一方で、吸収極大波長はほぼ一定の値を示した。これは、ユニットの末端β位に導入したアルキル鎖の分子内立体反発により、ユニット間が大きくねじれた結果、共役が縮環構造で局在化していることを示唆している。当日は1-3量体について単分子電気伝導度の結果も併せて発表する予定である。



1) Ie, Y. *et al.*, *J. Phys. Chem. Lett.* **2019**, *10*, 3197. 2) Ie, Y. *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*, 599.