

Ph-BTBT-アルキル誘導体のアルキル鎖長依存性と単結晶構造解析 Alkyl Length Dependence and Single Crystal Structure Analyses of Ph-BTBT-Alkyl Derivatives

産総研¹, KEK 物構研 PF/CMRC², 東大工³, °井上 悟¹, 峯廻 洋美¹, 近松 真之¹, 堤 潤也¹,
山田 寿一¹, 堀内 佐智雄¹, 田中 睦生¹, 熊井 玲児², 長谷川 達生^{1,3}

AIST¹, KEK-IMSS-PF/CMRC², U.Tokyo³, °Satoru Inoue¹, Hiromi Minemawari¹, Masayuki
Chikamatsu¹, Jun'ya Tsutsumi¹, Toshikazu Yamada¹, Sachio Horiuchi¹, Mutsuo Tanaka¹,
Reiji Kumai², Tatsuo Hasegawa^{1,3}

E-mail: satoru-inoue@aist.go.jp

ベンゾチエノベンゾチオフェン (BTBT) を母骨格とする BTBT 誘導体は、高い層状結晶性に由来する優れた半導体特性と高い溶媒溶解性を示すことから、プリントドエレクトロニクス向け有機半導体の最有力候補の一つである[1]。中でも、BTBT をフェニル基とアルキル基で非対称に分子置換した Ph-BTBT-アルキル誘導体は、高温での高次液晶相の発現と高いキャリア移動度の相関が飯野・半那らにより報告されている [2]。前回我々は、Ph-BTBT-C10 薄片単結晶の放射光による結晶構造解析により、非対称分子が分子配向を揃えて分子層を形成し、積層方向では分子配向を互い違いにする二分子層構造が形成されることを報告した[3]。本研究では、Ph-BTBT-アルキル誘導体の層状結晶構造がアルキル鎖長にどのように依存するかを調べたので報告する。

アルキル鎖長の異なる Ph-BTBT-C_n (n = 2~10)を合成し、単結晶構造解析を行った。その結果、-C8 および-C6 は、-C10 と類似の二分子層構造を示すことが分かった。これに対し鎖長が短い-C4 は、分子層内でヘリンボーン型構造を取るものの、分子配向は層内で a 軸方向に沿って互い違いになる構造をとることが分かった (図 1)。これに伴い、分子層内の分子間の HOMO どうしの移動積分もアルキル鎖長の変化により大きな影響を受け、a 軸に沿って大小を繰り返すことが分かった。講演ではアルキル鎖長とともに結晶構造がどのように変化するかを詳細に議論するとともに、各結晶性薄膜のモルフォロジーや半導体特性についても報告する。

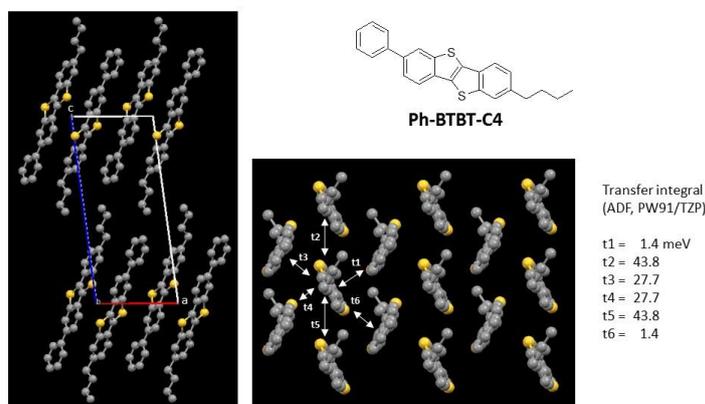


図 1 Ph-BTBT-C4 のパッキング構造と Transfer integral

[1]K. Takimiya *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **2007**, *129*, 15733 [2]H.Okamura *et al.*, 2nd International symp. SOMS, P-2 (2014) [3]峯廻ら, 第 35 回応用物理学会春季学術講演会 20a-E3-4 (2014)