

分子軌道を制御したジグザグ型有機半導体分子の合成と キャリア輸送特性

Synthesis of Zigzag Shaped Organic Semiconductors with Controlled Molecular Orbital and Carrier Transporting Property

○ 山元明人¹, 三津井親彦¹, 広瀬友里², 竹谷純一^{1,2}, 岡本敏宏^{1,3}

(1. 東大院新領域, 2. パイクリスタル, 3. JST さきがけ)

°Akito Yamamoto¹, Chikahiko Mitsui¹, Yuri Hirose², Jun Takeya^{1,2}, Toshihiro Okamoto^{1,3}

(1. Univ. of Tokyo, 2. PI-CRYSTAL Inc., 3. JST-PRESTO)

E-mail: a-yamamoto@organicel.k.u-tokyo.ac.jp

[緒言] 近年, 高移動度を示す塗布型有機半導体材料が多数報告されているが, その多くの分子軌道は分子長軸方向に対して位相が周期的に入れ替わる. このため, 集合体構造が精密に制御された状態においてのみ, 軌道の有効的な重なりが実現され, 高移動度が達成される.

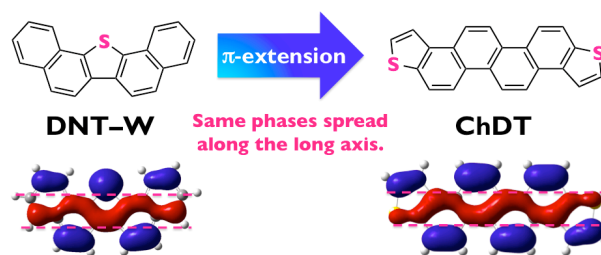


図 1. DNT-W と ChDT の分子構造と HOMO.

一方, 我々は W 字型構造を有する分子 (DNT-W: 図 1) が長軸方向に対して同位相の軌道が広がったユニークな分子軌道を有していることを報告した.¹ このような軌道形態を有する分子は集合体における分子長軸のズレに対してもトランスファー積分を著しく損なわないため, 汎用性を秘めた分子骨格であるといえる. 本研究では, 同様な形態の HOMO を有し, パイ共役系が拡張したジグザグ型分子クリセノ[2,1-*b*:8,7-*b'*]ジチオフェン (ChDT) に着目した. 今回, 更なるパイ共役系の拡張と溶液プロセス可能な溶解性を付与させる目的でアルキルチエニル基を導入した **C₁₀-Th-ChDT** (図 2) を開発したので報告する.

[実験と結果] ブロモ基を導入した ChDT を合成したのち, クロスカップリング反応により目的化合物である **C₁₀-Th-ChDT** を得た. 電気化学測定の結果, HOMO のエネルギー準位は -5.32 eV であり, チエニル基を導入することによりパイ系の拡張が確認された. さらに, X 線単結晶構造解析の結果, 本化合物はヘリングボーン型のパッキング構造を形成しており, 分子長軸に対しては 1.5 Å ずれているにもかかわらず, トランスファー積分は正の比較的大きな値を有しており, カラム方向に対して非常に小さな有効質量 1.05 m_0 をもつ優れたキャリア輸送能をもつ化合物であることが明らかとなった (図 2). 塗布結晶化法により成膜した単結晶薄膜は最高で 10 cm²/Vs を超える移動度を示した.

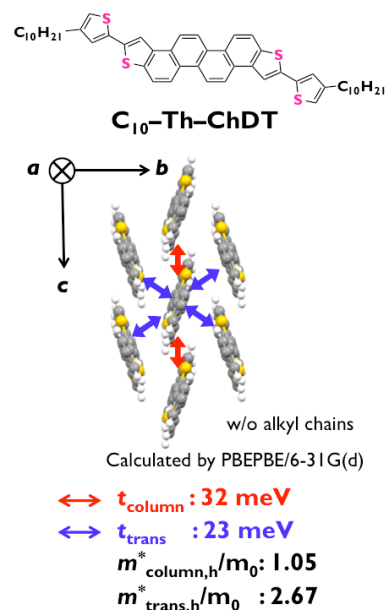


図 2. **C₁₀-Th-ChDT** の結晶構造, トランスファー積分と有効質量.

[1] T. Okamoto and J. Takeya *et al. Chem. Mater.* **2013**, 25, 3952.