

ビススチリルベンゼンの IP 値に及ぼすトリフルオロメチル基の位置効果

Position Effects of Trifluoromethyl Group on Ionization Potentials of

Bis-Styrylbenzene Derivatives

産総研 太陽光 °望月 博孝

RCPV AIST, °Hiroyuki Mochizuki

E-mail: h-mochizuki@aist.go.jp

【はじめに】ビススチリルベンゼン (BSD) は比較的高分子量ではないものの、共役長が長いことから高い光・電子特性を示す。一方で、BSD は導入する置換基により特性が大きく変化することが知られており、筆者はこれまでトリフルオロメチル基 (CF₃) を導入した BSD の光学特性を報告してきた¹。また光学特性のみならず電子特性も大きく変化し、特に導入位置が大きな因子となることが予想されることから、本研究では様々な位置に CF₃ を導入した BSD を合成し、その電子特性を評価したので報告する。

【実験】CF₃ を導入した 5 種の BSD を合成した。ここでは、様々な位置に導入された CF₃ を有するベンズアルデヒドを出発原料とした。これらのイオン化ポテンシャル (IP) は大気中光電子分光装置で測定した。

【結果と考察】表 1 に合成した BSD の構造式とその IP 値を示す。まず CF₃ の 2 置換の BSD では、末端ベンゼン環の 3 位に導入した 3CF の IP 値は -6.7 eV と最も低く、CF₃ の導入の効果を最も強く示している一方で、2 位に導入した 2CF の IP 値は -5.9 eV と最も高く、CF₃ の導入効果が最も小さいことがわかる。4 位に導入した 4CF は -6.5 eV と 3CF には及ばないものの効果は大きかった。次に、4 置換体では d2,4CF の IP 値は -6.5 eV と 4CF と同じであり、2 位に導入した CF₃ の影響が小さいことがこの現象からもわかる。また、d3,5CF の IP 値は -6.7 eV で 3CF と同じになり、CF₃ の数的効果は表れなかった。これは CF₃ による IP 値を低下させる限界に達したものと考えている。

1. H. Mochizuki et al. Jpn. J. Appl. Phys. 55 (2016) 022101.

Table 1. The chemical structures (CSs) and ionization potentials (IPs) of the compounds prepared in the present study.

Compounds	2CF	3CF	4CF	d2,4CF	d3,5CF
CSs					
IP (eV)	-5.9	-6.7	-6.5	-6.5	-6.7