

窒素含有アセンの合成とフラックス蒸発法による単結晶成長

Synthesis N-doped acenes and single crystal growth by flux evaporation method

(北大総合化学院¹・北大工学研究院²) ○酒井宣彦¹・柳瀬隆²・長浜太郎²・島田敏宏²¹Graduate School of Chemical Sciences and Engineering, Hokkaido University, ²Graduate School of Engineering, Hokkaido Univ., ○Nobuhiko Sakai¹, Takashi Yanase², Taro Nagahama², Toshihiro Shimada²

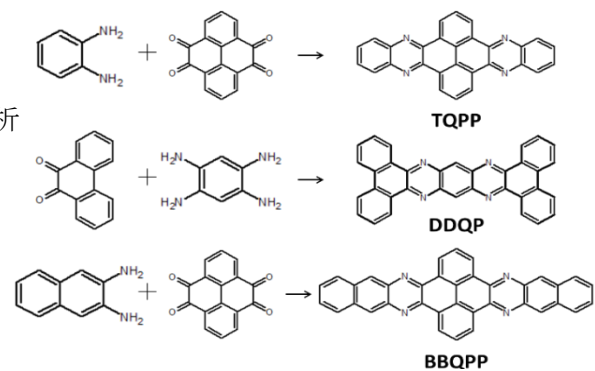
E-mail: n.sakai4869@cse.hokudai.ac.jp

【背景】

アセンは複数のベンゼン環が直線状に縮合した構造を持つ有機化合物であり、電子供与性の化学種をドーピングすることで、強磁性の発現や半導体としての応用が期待されている。半導体材料として重要な物性の1つに移動度がある。π共役系が広がるにつれ移動度が增大することが期待されるが、ここで問題となるのが芳香環の増大によって溶解度が急激に低下し、合成や精製が出来ない点である。溶解度を増すために側鎖に置換基を導入する方法が用いられるが、分子間のパッキングが変化して、移動度の点では不利になる可能性がある。そこで本研究では安定化のために窒素を導入したポリアセンを合成し、溶媒を工夫することにより、側鎖を導入しない方法でそれらの単結晶を作製した。

【実験】

本実験では *o*-ジクロロベンゼン溶媒中で Scheme. 1 に示す分子の合成を行った。NMR, FT-IR および質量分析により確認後、TQPP および DDQP は *o*-ジクロロベンゼン中で再結晶を行い、単結晶を作製した。BBQPP は *o*-ジクロロベンゼンには溶解しなかったため、ナフタレンを溶媒とする「フラックス蒸発法」を新たに開発し、単結晶を作製した。



Scheme.1 Synthesis of acenes

【結果】

TQPP, DDQP, BBQPP それぞれ針状の単結晶が得られた。また単結晶 X 線回折の結果、TQPP および DDQP に関しては既報^{[1][2]}の結晶構造と一致した。BBQPP の結晶構造の報告はなかったが、Fig. 1 のように決定できた。現在、FET 作製による移動度の評価、および構造との移動度の関係を明らかにするための計算を行っている。

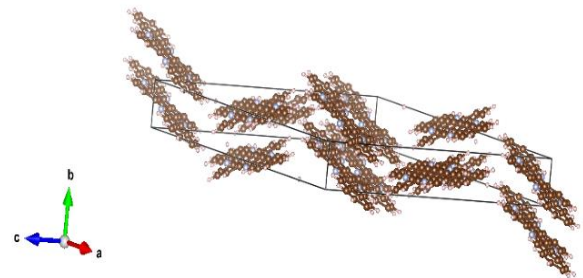


Fig.1. Crystal structure of BBQPP

[1] Brigitte Wex, *et al*, *Journal of Mol. Struct.* **1093** (2015) 144-149.[2] Wei Liu, *et al*, *Nature Chem.* **9** (2017) 563.