

熱前駆体法で成膜したテトラベンゾポルフィリン-ジケトピロロピロール連結分子における分子構造と薄膜構造の相関

Relation between Molecular and Thin-Film Structures in Tetrabenzoporphyrin-Diketopyrrolopyrrole Conjugates Deposited via a Thermal Precursor Approach

奈良先端大物質¹, 阪大院工² ◯岡本 直也¹, 鈴木 充朗², 山田 容子¹

NAIST¹, Osaka Univ.² ◯Naoya Okamoto¹, Mitsuharu Suzuki², Hiroko Yamada¹

E-mail: hyamada@ms.naist.jp

我々は、有機太陽電池への応用を志向し、熱前駆体法で成膜可能なテトラベンゾポルフィリン (BP) -ジケトピロロピロール (DPP) 連結化合物の開発を進めている^[1]。ここで熱前駆体法とは、熱脱離型の可溶化ユニットをもつ前駆体を塗布したのち、薄膜状態で熱反応を行って目的化合物に変換する成膜法を指す。この手法では、塗布型有機半導体で可溶化基として広く用いられる、長鎖アルキル基などの絶縁性置換基の導入を最小限に抑えた分子設計が可能になる。また、成膜プロセスに熱反応ステップが加わることで、従来とは異なるパラメータに基づく薄膜構造制御も可能になると期待される。

これまでの検討では、構成ユニットの連結順序が異なる C_n -DBD と C_n -BDB (Fig. 1a, b) について分子構造と薄膜構造の相関を調査した。その結果、 C_n -DBD の場合は DPP ユニット上のアルキル基が短い場合に face-on 型の分子配向をとることが分かった。一方、 C_n -BDB の場合は該当のアルキル基が長い場合でも face-on 配向を取り、低分子有機半導体でこれまでに度々報告されている、「分子のアスペクト比が大きくなるほど face-on 配向を取りやすい」^[2]という傾向には一致しない結果が得られた。従って、熱前駆体法で成膜した低分子有機半導体の分子配向は、従来とは異なる因子が支配的に作用して決定されている可能性がある。本発表では、より単純な連結化合物 C_n -BD (Fig. 1c) について分子配向を調査した結果を報告する。また、 C_n -BD, C_n -DBD, C_n -BDB を比較することにより、アルキル鎖長と BP ユニットの数が分子配向に与える影響を系統的に議論するとともに、得られた薄膜の電子物性についても報告する予定である。

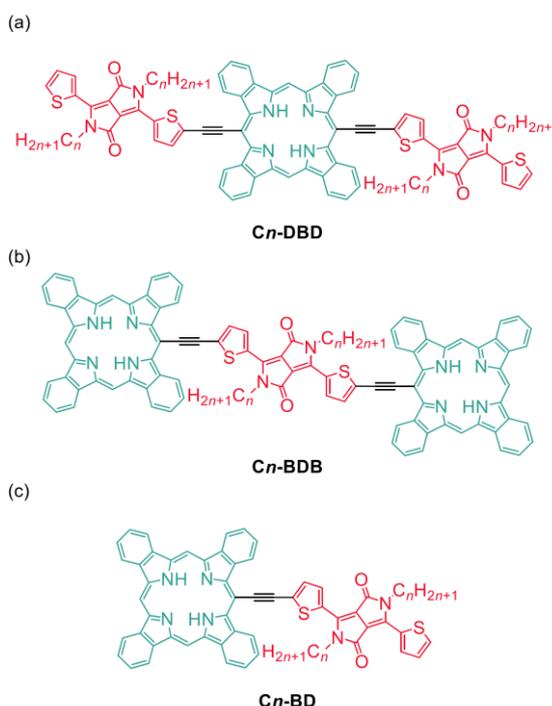


Fig. 1 Chemical Structures of C_n -DBD (a), C_n -BDB (b), and C_n -BD (c). $n = 4, 6, 8,$ or 10 depending on the length of alkyl chains on the DPP unit(s).

[1] Takahashi, K. et al. *J. Mater. Chem. A*, **2017**, *5*, 14003–14011. [2] For example: Love, J. A. et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 3597–3606.