キノイド構造を有するビスチエノイサチン誘導体の合成と物性

Synthesis and Properties of Quinoidal Bisthienoisatin Derivatives

東工大物質理工，°(M1)小原章宏，(D)長谷川司，芦沢実，松本英俊

°Akihiro Kohara, Tsukasa Hasegawa, Minoru Ashizawa, Hidetoshi Matsumoto

Department of Materials and Science and Engineering, Tokyo Institute of Technology, Japan

E-mail: kohara.a.aa@m.titech.ac.jp

【緒言】 有機電界効果トランジスタ(OFET)に用いられる多環芳香族化合物の中で、キノイド構造を持った分子は高い平面性と剛直性を有し、分子内の π 共役系の拡張に有利であり、狭いエネルギーギャップを示す。さらに分子間の π 軌道の重なりが大きくなることにより、キノイド構造を持った分子の電荷輸送特性は向上することが期待されている[1]。また、芳香族性の獲得による電子受容性を持ち、LUMO 準位の低下に伴い電子輸送特性を示すことが期待される。

本研究では、ビスチエノイサチン(BTI)[2]の両末端にチオフェン環またはベンゼン環を導入し、キノイド構造を有する新規な BTI 誘導体(**Th-BTI**、**Ph-BTI**)を合成した(**Fig. 1**)。さらにそれらの光学特性、酸化還元特性、電子構造、薄膜構造および OFET 特性を評価した。

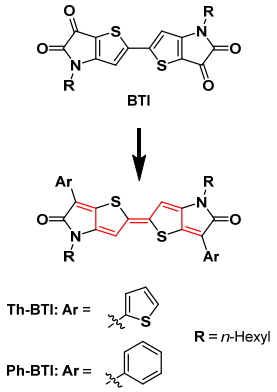

Fig. 1. Chemical structure of **Th-BTI** and **Ph-BTI**

【実験】 合成の詳細については当日報告する。$CHCl_3$/MeOH 溶液から得られた **Ph-BTI** の単結晶の X 線単結晶構造解析を行った。キャリアの輸送特性を調べるために、TTC (tetratetracontane)を製膜した SiO_2/Si 基板上に **Th-BTI** および **Ph-BTI** を真空蒸着法で製膜し、金電極を蒸着することでボトムゲート/トップコンタクト型の OFET を作製し、トランジスタ特性を評価した。

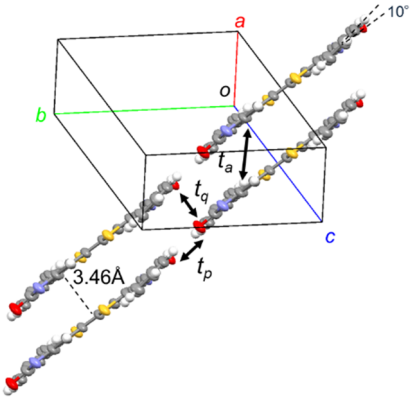

Fig. 2. Crystal structure of **Ph-BTI**

【結果・考察】 **Ph-BTI** の単結晶は三斜晶系、空間群は P(-1)であり、単位格子中に 1 分子が含まれている。中央の骨格は高い平面性を持ち、結合交替が起きていることからキノイド構造を持つことが確かめられた。*a* 軸方向にスタックを形成しており、電荷の一次元伝導パスの存在が示唆された。*a* 軸方向のトランスファー積分の値は HOMO、LUMO それぞれ t_a = 85 meV、t_a = -21 meV であった。

Ph-BTI の OFET はアンバイポーラ特性を示し、ホール移動度は 2.9×10^{-4} cm^2 V^{-1} s^{-1}、電子移動度は 8.0×10^{-4} cm^2 V^{-1} s^{-1} であった。

光学特性、酸化還元特性、電子構造、薄膜構造については当日報告する予定である。

[1] Kim, Y.; Hwang, H.; Kim, N.; Hwang, K.; Park, J.; Shin, G.; Kim, D. *Adv. Mater.* **2018**, *1706557*, 1–9.

[2] Luo, X.; Tran, D. T.; Sun, H.; Mi, T.; Kadlubowski, N. M.; Zhao, Y.; Zhao, K.; Mei, J. *Asian J. Org. Chem.* **2018**, *7* (11), 2248–2253.

© 2019年 応用物理学会