

## ジチエノナフトビスチアジアゾール骨格を有する縮環共役分子の励起子物性 Exciton Properties of Fused Ring Conjugated Molecule Based on Dithienonaphthobisthiadiazole

京大院工 ○(M1)佐藤 友揮, 山田 裕哉, 三木江 翼, 尾坂 格, 大北 英生

Kyoto Univ. ○Yuki Sato, Yuya Yamada, Tsubasa Mikie, Itaru Osaka, Hideo Ohkita

E-mail: sato21y@photo.polym.kyoto-u.ac.jp

縮環構造からなる $\pi$ 共役系分子は、高分子太陽電池におけるフラーレン誘導体に変わるアクセプター性材料として用いられるようになり、エネルギー変換効率の飛躍的向上に大きく貢献している。本研究では、電子受容性のジチエノナフトビスチアジアゾール骨格を中心コア構造に有する縮環系 $\pi$ 共役アクセプター分子 (図 1a, YS2) を新たに合成し、励起子物性を他の代表的な縮環系 $\pi$ 共役アクセプター分子 (図 1b,c) と比較検討した。

図 2 に YS2 の吸収および発光スペクトルを示す。溶液中においては 600 nm 付近ブロードな吸収帯を示すが、薄膜状態では 680 nm および 640 nm 付近に 0-0 遷移および 0-1 遷移に由来する振動バンドが観測された。薄膜状態において吸収ピーク波長が長波長シフトしたことから有効共役長が増大したことが示唆される。薄膜状態では、YS2 の末端インダノン基のカルボニル基と隣接チオフェニル基の硫黄との相互作用により共役平面構造が誘起され有効共役長が増大したと考えられる。

次に、薄膜状態における励起子寿命を単一光子計数測定法により測定したところ 850 ps と見積もられた。表 1 に示すように、類似のバンドギャップエネルギー $E_g$ を有する縮環系 $\pi$ 共役分子の励起子寿命と比較すると、IHIC (1.40 eV) や IT-4F (1.56 eV) より 4 倍程度長寿命化していることが分かった。YS2 と IHIC や IT-4F の分子構造を比較すると中心コアの構造に違いが見られる。IHIC や IT-4F では共役ユニットが一次元状に拡張しているのに対して、YS2 では二次元状に拡張している。YS2 と同様に中心コア共役ユニットが二次元状に拡張した分子 TACIC (1.59 eV) に対しても 1.6 ns もの長寿命が報告されている<sup>1)</sup>。したがって、中心コアユニットの縮環構造を二次元的に拡張することにより長寿命化できる可能性を示唆していると考えられる。

[参考文献] 1) T. Umeyama *et al.*, *Chem. Sci.*, **2020**, *11*, 3250–3257.

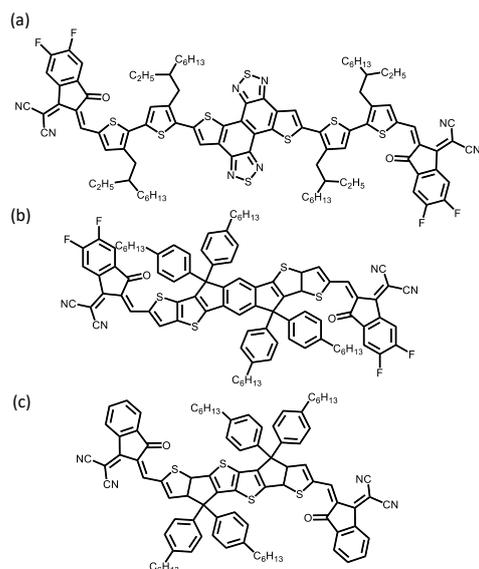


Fig. 1. Chemical structures of a) YS2, b) IHIC, and c) IT-4F.

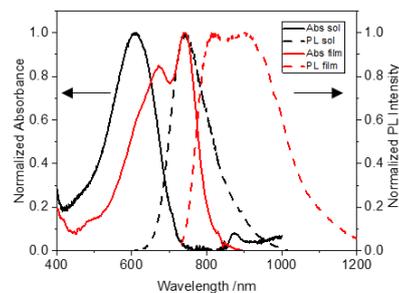


Fig. 2. Absorption and PL spectra of YS2.

Table 1. Exciton lifetime of NFA molecules.

NFA	$E_g$ / eV	$\tau_{ave}$ / ps
IHIC	1.40	240
YS2	1.48	850
IT-4F	1.56	200