

ブチル基置換 (チオフェン/フェニレン) コオリゴマーの結晶多形形成による光学特性の変化

Changes in optical properties of butyl group-substituted thiophene/phenylene co-oligomer by formation of crystal polymorphs

奈良先端大物質¹, 静岡大理², 産総研電子光技術³

○水野 斎¹, 甚上 知美¹, 阪東 一毅², 佐々木 史雄³, 柳 久雄¹

NAIST¹, Shizuoka Univ.², ESPRIT AIST³

○Hitoshi Mizuno¹, Tomomi Jinjyo¹, Kazuki Bando², Fumio Sasaki³, Hisao Yanagi¹

E-mail: hitoshi352-17@ms.naist.jp

結晶多形とは、一つの分子が取ることのできる異なる数種類の結晶系である。特に溶液からの結晶成長では、溶質と溶媒間の相互作用により、析出する段階でエネルギーの異なった状態で結晶化し、異なる分子配列や結晶構造を形成することがある [1]。この異なる結晶多形中では分子配向や結晶構造が異なるため、結晶としての物理的・光学的性質が異なる。この結晶多形は光・電子物性やデバイス特性にも大きな影響を与えるため、その構造を制御することは、高性能有機エレクトロニクスデバイスを実現するために重要である。

今回我々は、優れた光・電子物性を示す、(チオフェン/フェニレン)コオリゴマー (TPCO)の中でも有機溶媒に可溶で新規材料である、ブチル基置換 TPCO である BP1T-Bu (図 1(a)) [2]結晶の作製とその光学特性の評価を行った。

1,2,4-トリクロロベンゼンとジメチルスルホキシド (DMSO)を用いて溶液成長法により BP1T-Bu 結晶の作製を行ったところ、図 1(b)と図 1(c)のような青色と緑色発光を示す単結晶が得られた。X 線構造解析を行った結果、図 1(b)と図 1(c)の単結晶は、単斜晶と斜方晶に結晶化していることがわかった。図 2 は、単斜晶と斜方晶結晶の吸収・発光スペクトルを示している。単斜晶結晶では 500 nm, 斜方晶結晶では 520 nm 付近に 0-1 発光帯が観測されている。また、吸収端エネルギーも両者の結晶で異なっていることがわかる。これらの結果より、二種類の異なる結晶系の単結晶は、結晶多形の形成によるものであると言える。これまで TPCO 単結晶の光学特性については数多く報告がなされているが、結晶多形の存在とその光学特性については、本研究で初めて示された。

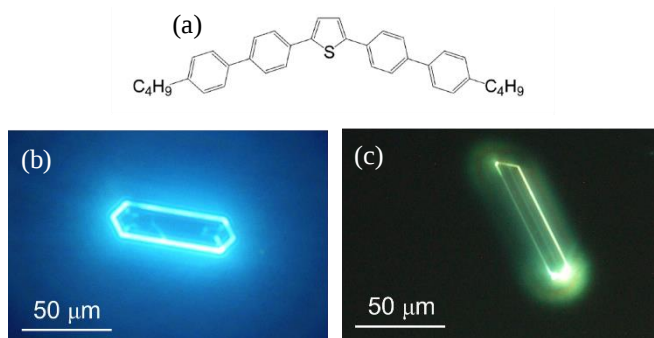


Fig. 1. (a) Molecular structure of BP1T-Bu. Monoclinic (b) and orthorhombic (c) crystals of BP1T-Bu.

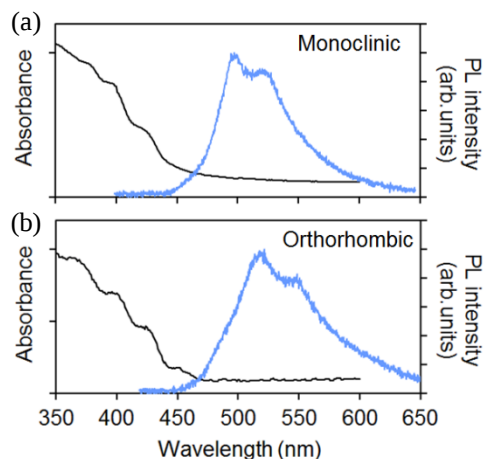


Fig 2. Absorption and photoluminescence spectra of monoclinic (a) and orthorhombic (b) crystals of BP1T-Bu.

[1] Y.-G. Zhen, H.-L. Dong, L. Jiang, W.-P. Hu, *Chinese Chemical Letters* **2016**, 27, 1330.

[2] T. Yamao, T. Miki, H. Akagami, Y. Nishimoto, S. Ota, S. Hotta, *Chem. Mater.* **2007**, 19, 3748.