

[*n*]CPP (シクロパラフェニレン) の電子状態Electronic structure of [*n*]CPP (*n*-cycloparaphenylenes)

東理大・理工物理 ○(M1)井上 拓也, (B)古市 貴也, 金井 要

Department of Physics, Faculty of Science and Technology, Tokyo University of Science,

○Takuya Inoue, Takaya Furuichi, Kaname Kanai

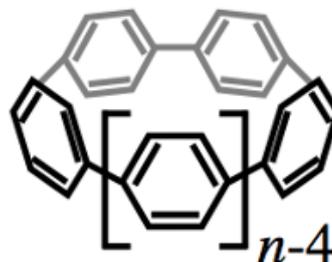
E-mail: 6220504@ed.tus.ac.jp

近年、新しい光電子デバイス材料として注目されている有機半導体は、幅広い用途への利用の可能性を持ち、有機トランジスタ、有機 EL、有機太陽電池などへの応用研究が盛んに行われている。その一方、これらの分子は一般に平面性の高い構造であり、その基本骨格のバリエーションは少ない。その点で、フラーレンやカーボンナノチューブ (CNT) に代表される曲面構造を持った π 共役系分子は新しい有機半導体分子として興味深い。近年では、アームチェア型 CNT の最小構成単位として考えられている *n*-cycloparaphenylenes ([*n*]CPP, 以下 CPP と略す。) と呼ばれる分子 (Fig.1) が注目されている^[1]。CPP は、ベンゼン環がパラ位で環状に繋がった構造を持つ π 共役系分子である。2008 年に CPP が初めて合成されて以来、異なるベンゼン環の個数 (鎖長) を持つ CPP の合成が多数報告されており、鎖長の増加に従ってエネルギーギャップが増大するということが理論計算や実験によって明らかになっている^[2,3]。また、それに対応して蛍光波長は鎖長に伴って短波長シフトする。この性質は、一般的な直鎖状 π 共役系有機化合物とは対照的な傾向である。このような特異な光学特性を持つ CPP の電子状態を明らかにすることは、直鎖状 π 共役系分子では成し得ない性質を有する新規有機デバイス開発への足掛かりとなると同時に、今後の非平面 π 共役系分子を開発する上で重要な情報を与える可能性を秘めている。

本研究では、[*n*]CPP (*n* = 8, 9, 12) 真空蒸着膜の電子状態の直接的な観測によるエネルギーギャップの見積もり、並びに紫外可視吸収分光法を用いた光学ギャップの見積もりを行い、理論計算との比較を通してエネルギーギャップの鎖長依存性を実験的に明らかにした。講演では、実験結果と理論計算の結果を比較することで、CPP の電子状態の成り立ちについて議論する予定である。特に、直鎖構造の Paraphenylene (以下、PP と略す。) との比較を通して、構造が湾曲することによる電子状態への影響に焦点を当てる。

<参考文献>

- [1] H. Omachi *et al.*, *Nat. Chem.*, **2013**, *5*, 572–576,
 [2] R. Jasti *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **2008**, *130*, 17646–17647,
 [3] T. Iwamoto *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **2011**, *133*, 8354–8361.

Figure 1. Molecular structures of [*n*]CPP