

カルコゲン原子の違いによるメチルカルコゲノ化ピレンの 結晶構造と電荷輸送特性への影響

Effects of Chalcogen Atoms on Crystal Structure and Transport Properties of Merhylchalcogenated Pyrenes

理研¹, 東北大², 東北大 AIMR³ ○ブルガレビッチ キリル¹, 瀧宮和男^{1,2,3},
大垣拓也¹, 堀内信吾^{1,2},

RIKEN¹, Tohoku Univ.², AIMR Tohoku Univ.³

○Kirill Bulgarevich¹, Kazuo Takimiya^{1,2,3}, Takuya Ogaki¹, Shingo Horiuchi^{1,2}

E-mail: kirill.bulgarevich@riken.jp, takimiya@riken.jp,

有機半導体結晶の brickwork 構造は、分子軌道の 2 次元的な重なりを実現できるため、高移動度の有機電界効果トランジスタ (OFET) に有望であると考えられている。これまで brickwork 構造を取る化合物は 6,13-bis((triisopropylsilyl)ethynyl)pentacene (TIPS-pentacene)などの限られたものしか知られていなかった。しかし、我々は最近 1,3,6,8-位にメチルチオ基を導入したピレン誘導体 (MT-pyrene)がこの構造を取り、単結晶 OFET として $30 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ を超える高移動度を示すことを報告した[1]。ピレンの dimeric herringbone (図 1a)から MT-pyrene の brickwork (図 1b)への結晶構造変化は二量体間相互作用の大部分を占める CH- π 相互作用がメチルチオ基の導入により不可能になったことが原因で、他のメチルカルコゲノ基でも同様な効果が予想された。

我々は本研究で、MT-pyrene の硫黄原子を酸素とセレンにそれぞれ置き換えた MO-及び MS-pyrene を新たに合成し、その結晶構造と単結晶 OFET を用いて電荷輸送特性を評価した。両化合物は MT-pyrene と類似の brickwork 構造を取ることが分かり(図 1c, 1d)、OFET として理想的に近い動作をした(図 1e, 1f)。MO-pyrene の移動度は $\sim 0.03 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ とかなり低く、MS-pyrene も最大 $7.3 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 程度で MT-pyrene の高移動度には及ばなかった。また、これらの値は結晶構造をもとにホッピングモデル[2]から予想される値とよく一致した。当日はこれらの化合物の分子構造、結晶構造の細かな違いと、それに起因する電荷輸送特性の差について議論する。

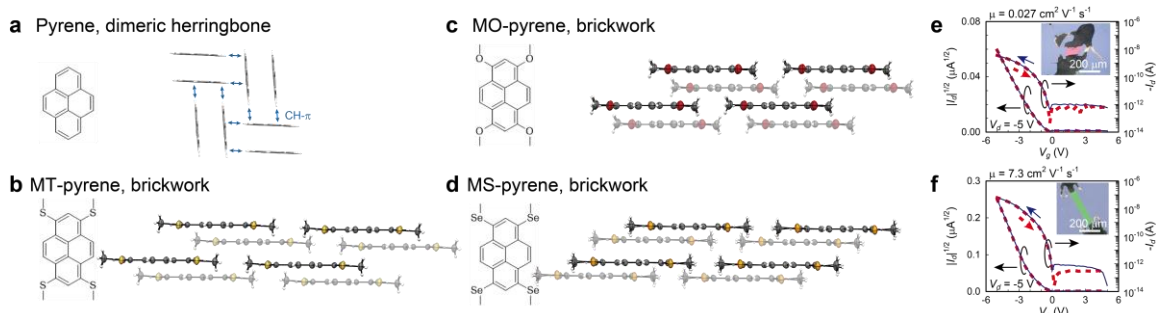


図 1. ピレン(a), MT-pyrene (b), MO-pyrene (c), MS-pyrene (d)の分子構造と結晶構造。MO-pyrene (e), MS-pyrene (f)の伝達特性と単結晶 OFET 写真。b-d の濃い(薄い)色で示された分子は手前(奥)の brickwork 層。

[1] K. Takimiya, K. Bulgarevich *et al.*, *Adv Mater.*, **33**(32) e2102914 (2021).

[2] Wen, S.-H., *et al.*, *J. Phys. Chem. B*, **113**(26) 8813-8819 (2009).

【謝辞】本研究の一部はJSPS科研費 JP19H00906, JP20H05865, 20K22421の助成を受けて行われたものである。