

ヨウ素-ヨウ素相互作用を鍵とする二置換型非対称有機半導体材料の分子配向制御と電荷輸送特性

(山形大院理工¹・山形大院有機²) ○蓮見翔¹・松永周¹・熊木大介²・時任静士²・片桐洋史^{1,2}

Controlling Molecular Orientation and Charge Transport Properties of Disubstituted Asymmetric Organic Semiconductor Materials based on Iodine-iodine Interactions (¹Graduate School of Science and Engineering Yamagata Univ., ²Graduate School of Organic Materials Science Yamagata Univ.) ○Kakeru Hasumi,¹ Amane Matunaga,¹ Daisuke Kumaki,² Shizuo Tokito,² Hiroshi Katagiri^{1,2}

Highly ordered molecular orientation and high solubility are required for organic field-effect transistor (OFET) materials. In this study, we focused on the asymmetric thienoacene skeleton (DTBT), which can introduce substituents at both ends of the molecule, and investigated the molecular orientation and charge transport properties of the alkyl iodo- and diiodo- derivatives (I-DTBTC8 and DI-DTBT).

I-DTBTC8 and DI-DTBT were synthesized via selective lithiation of DTBT. DI-DTBT showed significantly higher p-type semiconductor properties than DTBT and I-DTBTC8 (DTBT: No gate effect, I-DTBTC8: $2.5 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{Vs}$, and DI-DTBT: $0.12 \text{ cm}^2/\text{Vs}$). Single-crystal X-ray diffraction showed that DTBT and I-DTBTC8 have small overlap between the π -conjugated skeletons, whereas DI-DTBT is no disordered and shows a parallel orientation with large overlap of orbitals. In other words, the introduction of iodine at both ends of the molecule resulted in a molecular orientation favorable for charge transport without compromising solubility, and the intermolecular iodine-iodine interactions contributed to the stabilization of the packing structure.

Keywords : Herringbone Structure, Halogen-Halogen Interaction, Thienoacene

有機電界効果トランジスタ(OFET)材料では高い分子配向性と溶解性が求められる。本研究では、分子両末端に置換基導入可能な非対称チエノアセン(DTBT)に着目し、ジヨード体(DI-DTBT)とアルキルヨード体(I-DTBTC8)の分子配向性と電荷輸送特性について調査した。

I-DTBTC8 と DI-DTBT は、DTBT の選択的なりチオ体を経由するヨード化により合成した。ドロップキャスト法により作製した OFET デバイスはジヨード体が DTBT, I-DTBTC8 よりも非常に高い p 型半導体特性を示した(DTBT: No gate effect, I-DTBTC8: $2.5 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{Vs}$, DI-DTBT: $0.12 \text{ cm}^2/\text{Vs}$)。また、単結晶 X 線構造解析の結果、DTBT, I-DTBTC8 は π 共役骨格同士の重なりが小さい構造を示す一方で、DI-DTBT は disorder せず、大きな軌道の重なりを持つ平行構造を示した。これらの結果、分子両末端にヨウ素を導入することで溶解性を損なわず、電荷輸送に有利な分子配向が得られること、分子間ヨウ素-ヨウ素相互作用がパッキング構造の安定化に寄与していることが明らかになった。

