

ベンゾイソキノリノキノリンジアミドの位置選択的なハロゲン化

(東大工¹・東大院新領域²・株式会社ダイセル³・JST CREST⁴) ○林 篤志¹・Craig P. Yu²・山元 明人³・熊谷翔平²・竹谷 純一^{1,2}・岡本 敏宏^{1,2,4}

Regioselective Halogenations of Benzo[de]isoquinolino[1,8-gh]quinoline Diamides (¹*The University of Tokyo*, ²*Daicel Corporation*, ³*CREST, JST*) ○Atsushi Hayashi,¹ Craig Yu,¹ Akito Yamamoto,² Shohei Kumagai,¹ Jun Takeya,¹ Toshihiro Okamoto^{1,3}

Based on our work on nitrogen-containing perylene diimide derivatives of promising n-type organic semiconductors, very recently, we have developed a new π -electron core, BQQDA. The BQQDA core has amides instead of imide moieties to control the electronic properties and aggregated structures. In this study, the halogenation effects on the BQQDA core were investigated to control their molecular orbitals, aggregated structures, and charge-transport capabilities. Regioselective halogenations were achieved by various halogenation reagents, which was confirmed by single crystal structure analyses, and their characterizations were carried out.

Keywords: *n-Type Organic Semiconductor; Nitrogen-Containing π -Electron System; Halogenation; Regioselectivity; Molecular Assembly*

次世代の有機半導体材料の開発に向けては、移動度の向上のみならず、実用的およびプロセス上の観点からも化合物の高い熱的・化学的安定性が望まれている。p 型よりも研究開発が遅れている n 型有機半導体を開発すべく、当研究室では、代表的な n 型有機半導体骨格であるペリレンジイミド (PDI) に注目し、ペリレン骨格の炭素元素を窒素元素に置換した benzo[de]isoquinolino[1,8-gh]quinoline-tetracarboxylic diimide (BQQDI) を開発

した。特に、フェネチル置換 BQQDI は高移動度かつ高安定性を有することを報告した^{1,2)}。ごく最近、BQQDI のイミド部位をアミドに置き換えた新規 π 電子系骨格 benzo[de]isoquinolino[1,8-gh]quinolinetetracarboxylic diamide (BQQDA) を設計、合成し³⁾、電子状態や集合体構造の制御およびデバイス応用に関する研究を進めている。本研究では、BQQDA における分子軌道準位や集合体構造制御を目的として、位置選択的なハロゲン化を検討した。新たに開発した反応では、パラジウム触媒の有無により、bay 位 (5,11 位) もしくは ortho 位 (6,12 位) に選択的にハロゲン化できることが明らかとなった。本発表では、集合体構造や基礎物性評価等についても併せて報告する。
1) Okamoto, T. *et al.*, *Sci. Adv.*, **2020**, *6*, eaaz0632. 2) Kumagai, S. and Okamoto, T. *et al.*, *Acc. Chem. Res.*, **2022**, accepted. 3) Yu, C. P. and Okamoto, T. *et al.* submitted.

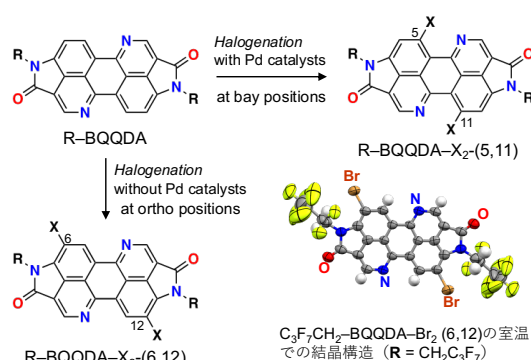


Figure. アルキル置換 R-BQQDA の選択的なハロゲン化と C₃F₇CH₂-BQQDA-Br₂-(6,12) (R = CH₂C₃F₇)の室温での結晶構造。