

フッ素化ペンタレンジオン誘導体の合成、物性ならびに半導体特性評価

(阪大産研) ○横山 創一・家 裕隆

Synthesis, Physical Properties, and Semiconductor Characteristics of Fluorinated Pentalene-1,4-dione Derivatives (*SANKEN, Osaka University*) ○Soichi Yokoyama, Yutaka Ie

It is well-known that D-A type π -conjugated molecules including diketopyrrolopyrrole (DPP) as an electron-accepting unit show high carrier mobility in its aggregate because of the strong D-A interaction in the packing structure. In this work, we designed and developed a fluorinated pentalene-1,4-dione (FPD) unit as a novel electron acceptor to enhance electron affinity and intra-/intermolecular interaction. Furthermore, we synthesized D-A type π -conjugated derivatives containing terminal oligothiophenes (n T) and the central FPD unit toward organic electronic materials, and investigated their photophysical/electrochemical properties, thermal properties, and packing structures. UV-vis absorption spectra of the **3T-FPD** with terthiophenes showed a large absorption band at 612 nm ($\epsilon = 9.26 \times 10^4 \text{ M}^{-1}$) in dichloromethane, which is shorter absorption wavelength and higher molecular absorption coefficient compared to the corresponding **3T-DPP**. From the result of X-ray diffraction, **3T-FPD** molecule formed highly planar structure by intramolecular interaction and π - π stacking structure derived from D-A intermolecular interaction. *Keywords*: Pentalenedione; Fluorinated compound; π -conjugated molecule; Diketopyrrolopyrrole; Organic Semiconductor

電子受容性ユニットであるジケトピロロピロール (DPP) は、D-A 型 π 共役分子構造に組み込むことによって優れた電荷輸送特性を示すことから有機半導体材料への応用が期待されている。一方、DPP 中に含まれる電子豊富な窒素原子により、DPP 単体で見ると HOMO、LUMO 準位は決して深くはない。本研究では、DPP ユニット内の窒素原子を電子求引性である CF_2 基に組み替えたフッ素化ペンタレンジオン (FPD) を設計し、アクセプターユニットとして組み込んだ D-A-D 型 π 共役誘導体を合成し、その基礎物性ならびに半導体特性を評価した。FPD の両末端にターチオフェンを組み込んだ **3T-FPD** は、**3T-DPP** よりも短波長側に極大吸収波長 (612 nm, $\epsilon = 9.26 \times 10^4 \text{ M}^{-1}$) を示した。単結晶 X 線構造解析結果から、**3T-FPD** は高い平面性を示し、 π - π スタッキング構造を形成した。また、このスタッキング内の移動積分は、ホール輸送に対して 118 meV、電子輸送に対して 49 meV と大きな値を示し、電荷輸送に対して有利に働くことが示唆された。

