

アセノビスチアジアゾール骨格を中心に組み込んだ D-A 型近赤外吸収色素の合成と物性評価

(阪大産研) ○宇都宮 桜・横山 創一・家 裕隆

Synthesis and Physical Properties of D-A-D type NIR-Absorbing Dyes with Acenobisthiadiazole as a Central Unit (*SANKEN, Osaka University*) ○Sakura Utsunomiya, Soichi Yokoyama, Yutaka Ie

Near-infrared absorbing dyes have been attracted in their diverse application such as organic solar cell materials. Incorporating donor-acceptor (D-A) structure or electron-accepting unit with a strong biradical character into π -conjugated structure is well-established approaches to obtain narrow HOMO-LUMO gap. In this presentation, we report the synthesis and physical properties of π -expanded acenothiadiadiazole derivatives with B-N linkages between D and A units. UV-vis absorption spectrum of the derivative **L2B₂**, which has the B-N linkages between a fluorinated naphthobisthiadiazole unit and terminal indenopyrrole (IP) units, showed an absorption band at 1091 nm. We found that the combination of π -extension with B-N linkages contributes to decreasing the HOMO-LUMO gap. We also developed new π -conjugated molecule **L3**, which is composed of a central benzobisthiadiazole and terminal IP units. Irrespective of the absence of B-N linkages, **L3** showed an absorption maximum at 1095 nm. **Keywords** : NIR-Absorbing Dyes, Organic Electronics, π -Conjugated Molecule, Organic Semiconductor, Thiadiazole

近赤外 (NIR) 吸収色素は、光学分野や有機太陽電池への応用が期待されている有機材料である。NIR 領域に吸収を示す分子設計として、ドナー-アクセプター(D-A)構造やビラジカル性による狭HOMO-LUMOギャップ化があげられる。¹⁾ 当研究室では、フッ素化ナフトビスチアジアゾール (FNTz) の開発に成功しており、FNTz を導入した非フラーレン型アクセプターの開発に取り組んできた。²⁾ 本研究では、高い電子受容性を示す FNTz やベンゾビスチアジアゾール (BBTz) に π 拡張ピロールを組み込んだD-A-D型構造 (**L1-L3**) ならびにホウ素架橋した **L1B₂** と **L2B₂** を合成し各ユニットやホウ素架橋が与える光学・電子物性への影響を調べた (Figure 1a)。UV-vis-NIR 吸収スペクトル測定から、**L1B₂** ならびに **L2B₂** の極大吸収波長はそれぞれ 832, 1091 nm を示し、ホウ素架橋前の **L1**, **L2** と比べると大きく長波長側にシフトすることが明らかとなった (Figure 1b)。これはホウ素架橋に伴った低 LUMO 化に起因することが分子軌道計算から示唆された。興味深いことに、ホウ素架橋をもたない **L3** も近赤外領域の 1095 nm に極大吸収波長を示した。

[1] Nakano, M., *Chem. Rec.* **2017**, 17, 27.

[2] Ie, Y., *et al.*, *Acc. Chem. Res.* **2021**, 54, 132.

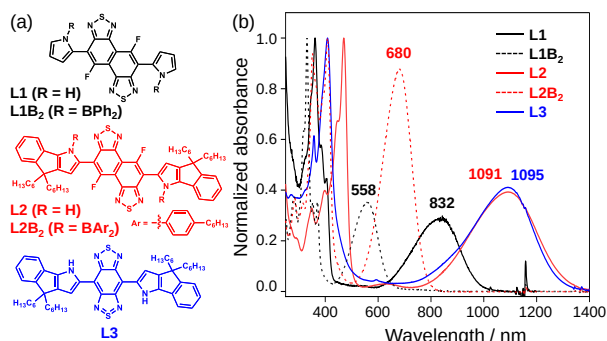


Figure 1. (a) Molecular structures and (b) UV-vis. absorption spectra of acenobisthiadiazole derivatives **L1-L3**, **L1B₁** and **L2B₂**.