

トリル基を置換した非対称 BTBT 系有機半導体の 層状結晶性と半導体特性

Layered Crystallinity and Semiconductor Property of Unsymmetrically Substituted BTBT Derivatives Having Tolyl Groups.

東大院工¹, 産総研², 埼玉大³ 井上 悟¹, 宮田 稜¹, 東野 寿樹², 田中 睦生³,
荒井 俊人¹, 松岡 悟志¹, 堀内 佐智雄², 長谷川 達生¹

U. Tokyo¹, AIST², SIT³

Satoru Inoue¹, Ryo Miyata¹, Toshiki Higashino², Mutsuo Tanaka³, Shunto Arai¹,
Satoshi Matsuoka¹, Sachio Horiuchi², Tatsuo Hasegawa¹

E-mail: satoru.inoue@ap.t.u-tokyo.ac.jp

我々はこれまでに、ベンゾチエノベンゾチオフェン(BTBT)系 π 電子骨格をアルキル基およびフェニル基で非対称に化学修飾したいくつかの有機分子が、2分子膜型層状ヘリンボーン(*b*-LHB)構造を形成し、TFT性能向上に有効な層状結晶性を著しく増強することを見出してきた[1,2]。その高い層状結晶性の起源には、長鎖アルキル基の層状秩序化が重要な役割を果たしている[3]。一方、アルキル基の対になる置換基の種類もまた、どのような層状結晶構造が構築されるのかを決定する重要な役割を担っていることがフェニルエチニル基置換BTBT系有機半導体に関する研究を通して明らかになりつつある[4]。長鎖アルキル基置換によりみられる *b*-LHB 構造は、分子長軸を揃えて形成される分子層が置換基の層同士を向かい合わせて積層することで構成されるため、置換基末端が積層秩序の形成に重要な役割を担っているものの、その種類や効果についての理解は未だ得られていない。そこで我々は今回、トリル基とアルキル基を非対称に置換した有機半導体に着目した。トリル基は異性体構造によって末端基となるメチル基の分子長軸に対する伸長方位が異なるため、層状結晶構造の積層秩序や半導体特性が大きく変貌することが期待できる。本発表では、トリル基を置換した材料の単結晶構造解析や単結晶トランジスタの評価を通じて、異性体構造の違いに伴う構造-物性相関を明らかにしたので報告する。

Fig. (a)に示すトリル-アルキル非対称置換 BTBT の薄片結晶の単結晶 X 線構造解析を行ったところ、*m*-Tol-BTBT-C10 では Ph-BTBT-C10 と同形となる *b*-LHB 結晶構造を取ることがわかった(Fig. (b))。一方で、*p*-Tol-BTBT-C10 では分子長軸を同一方向に揃えて層を形成するこれまでにない層状ヘリンボーン構造(Fig. (c))が得られることがわかった。さらに、*p*-Tol-BTBT-C10 の単結晶薄膜からなる BGTC 型及び BGBC 型トランジスタではそれぞれ 6 および 2 cm²/Vs という高い電界効果移動度を示すことがわかった。講演では、TFT 特性と材料の有する層状結晶構造との相関についても議論する。[1] S. Inoue *et al.*, *Chem. Mater.* **2015**, *27*, 3809. [2] S. Inoue *et al.*, *Chem. Mater.* **2018**, *30*, 5050. [3] S. Inoue *et al.*, *Chem. Sci.* **2020**, *11*, 12493. [4] 井上、二階堂等、本応用物理学会講演会

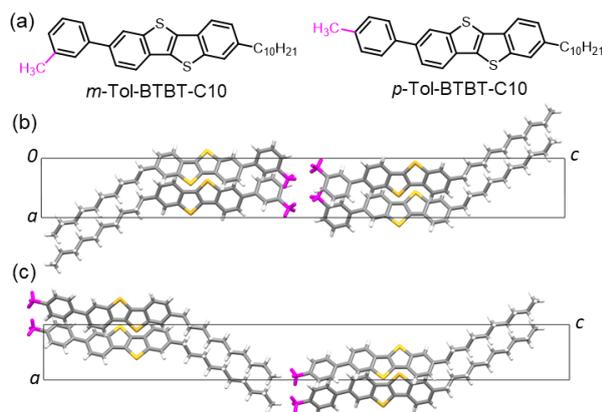


Fig.(a) Chemical structures of Tolyly-substituted BTBT's. (b) Crystal packing of *m*-Tol-BTBT-C10. (c) Crystal packing of *p*-Tol-BTBT-C10.