



# β-メチルカルコゲノ基を有するオリゴチエノアセン類の合成と物性 Synthesis and Properties of β-Methylchalcogeno-Substituted Oligothienoacenes

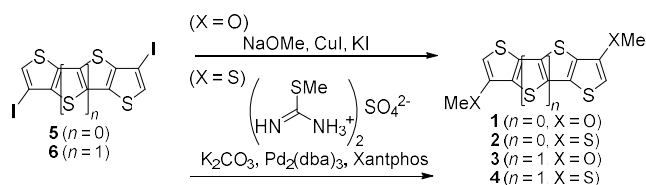
金澤 輝石、川畑 公輔、瀧宮 和男（東北大学大学院 理学研究科 化学専攻）

【緒言】有機半導体における分子集合体中での分子配列、すなわち結晶構造は、そのキャリア輸送能と密接な関係がある。しかし、結晶構造の制御、予測は多くの分子間相互作用を考慮する必要があり達成されていない。この分子間相互作用への理解が最大の課題となっている。

有機半導体分子の中で最も高いキャリア輸送能をもつ分子の一つである rubrene は、傾斜型 π 積層構造と呼ばれる結晶構造をもつ。最近ベンゾジチオフェン (BDT) のβ位にメチルチオ基を導入した分子も同様の結晶構造をとることが報告された<sup>[1]</sup>。さらに BDT に類似の一連の分子に対しβ-メチルチオ化した場合にも同様の構造が得られることが明らかにされた<sup>[2][3]</sup>。これらの母体分子は herringbone と呼ばれる結晶構造であり、β-メチルチオ基による傾斜型π積層構造への変化は一般性があると考えられる。

そこで本研究では異なる母体構造での置換基導入の効果を調査するために、一次元π積層構造をとるオリゴチエノアセンにβ-メチルカルコゲノ基を導入した新規有機半導体分子 **1-4** を合成し、結晶構造中での分子間相互作用の解析を行った。

【結果・考察】**1-4** の合成は、それらの共通中間体となる **5, 6** を経て Scheme 1 に示す方法で行った。単離、精製後に結晶化を行い、単結晶 X 線構造解析により結晶構造を明らかにした。その一例として **4** の結晶構造を母体分子とともに示す (Fig.1)。当初の予想通り母体分子と **4** の構造は大きく異なっており、これらの結晶構造をもとに理論計算による分子間相互作用の空間的解析と相互作用エネルギーの解析を行い、置換基による結晶構造への影響について考察した。



Scheme 1 化合物 **1-4** の合成 ( $n = 0, 1$ )

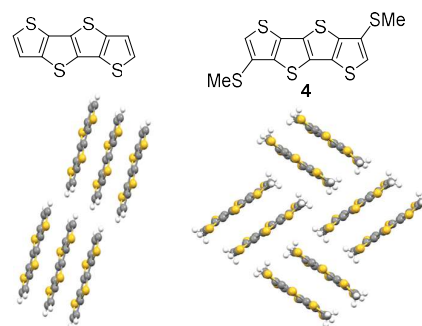


Fig.1 母体分子と化合物**4**の結晶構造

## <参考文献>

- 1) C. Wang, *et al.*, *Chem. Commun.*, **2017**, 53, 9594-9597.
- 2) H. Takenaka, *et al.*, *Chem. Mater.*, **2019**, 31, 6696-6705.
- 3) C. Wang, *et al.*, *Chem. Sci.*, **2020**, 11, 1573-1580.

## 発表者紹介

氏名 金澤 輝石 (かなざわ きせき)  
 所属 東北大学大学院 理学研究科 化学専攻  
 学年 修士1年  
 研究室 有機化学第二研究室

