

非対称型メゾ置換テトラベンゾポルフィリンの結晶構造と電荷輸送特性

(奈良先端大先端科技¹・京大化研²) ○宮崎 和哉¹・松尾 恭平²・水畑 吉行²・荒谷直樹¹・山田 容子²

Crystal Structure and Charge Transport Properties of Unsymmetrically *Meso*-substituted Tetrabenzoporphyrins (¹*Graduate School of Science and Technology, Nara Institute of Science and Technology*, ²*Institute for Chemical Research, Kyoto University*)

○Kazuya Miyazaki¹, Kyohei Matsuo², Yoshiyuki Mizuhata², Naoki Aratani¹, Hiroko Yamada²

Tetrabenzoporphyrins (TBPs) have attracted much attention as excellent organic semiconductor materials for their two-dimensionally extended π -conjugated systems. Recently, we have found that a TBP derivative with different substituents at 5,15-positions formed two-dimensional packing with antiparallel slipped π -stacking, which is promising for charge transport¹⁾. However, the local dimeric structure in the packing suppressed efficient charge transport, resulting in a maximum hole mobility of only $0.71 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$. In this study, we synthesized a new unsymmetric TBP derivative, **C₈Ph-Ph-TBP**, which has a long alkyl substituent at only one side of the 5,15-positions. Single-crystal X-ray structure analysis revealed that **C₈Ph-Ph-TBP** formed bilayer lamellar packing in which the TBP scaffold formed a herringbone structure. Its OFET characteristic will be discussed.

Keywords : Tetrabenzoporphyrin; Crystal Structure Analysis; Organic Field-Effect Transistors

テトラベンゾポルフィリン(TBP)は二次元的に広がった π 共役系を有する色素骨格であり、優れた有機半導体材料として注目を集めている。最近我々は 5,15 位に異なる置換基を導入した TBP 誘導体が、反平行に向き合いながらずれたパイスタックをとり、電荷輸送に有利な二次元パッキングを形成することを見出した¹⁾。一方、局所的な二量体の形成によって、立体的・電子的な不均衡を打ち消す構造を形成しており、ホール移動度は最大でも $0.71 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ に留まった。今回、我々は 5,15 位の一方にのみ長鎖アルキル基を導入した新たな非対称 TBP 誘導体 **C₈Ph-Ph-TBP** を合成し、単結晶 X 線構造解析を行ったところ、二分子膜型のラメラ構造を形成し、分子の向きが揃ったパイスタックを与えることを見出した。また層内部では TBP 骨格がヘリングボーン構造を形成していた。発表では、OFET 作製・評価についても議論する。

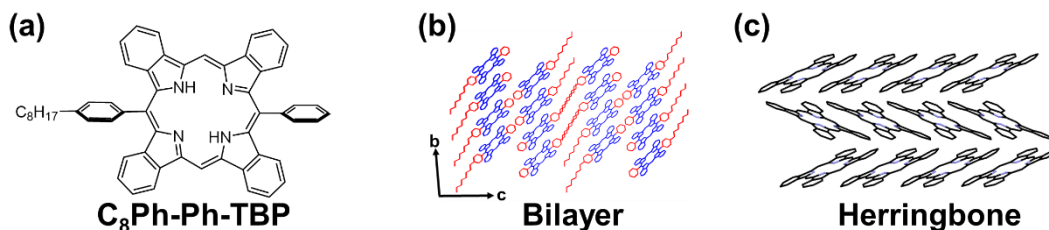


Figure 1. (a) Molecular structure and (b, c) packing structures of **C₈Ph-Ph-TBP**.

- 1) K. Miyazaki, K. Matsuo, H. Hayashi, M. Yamauchi, N. Aratani, H. Yamada, *Org. Lett.* **2023**, 25, 7354.