

電子不足コアユニットとしてキノキサリン誘導体を導入した非縮環非フラレーンアクセプターの開発

(兵庫県大院工) ○山田健太・鈴木 航・梅山 有和

Development of Non-Fused Non-Fullerene Acceptors with Quinoxaline Derivatives as Electron-Deficient Core Units (*Graduate School of Engineering, University of Hyogo*)

○Kenta Yamada, Wataru Suzuki, Tomokazu Umeyama

As novel acceptor-donor-acceptor'-donor-acceptor (A-D-A'-D-A) type non-fused non-fullerene acceptors, we synthesized CRIC and BRIC, both of which have a quinoxaline (Qx) derivative as the central A' unit, dithienocyclopentadiene as the D units, and difluorinated 1,1-dicyanomethylene-3-indanone as the terminal A units. The Qx unit has two phenyl rings at 2- and 3-positions in CRIC, whereas the two phenyl rings are fused in BRIC. The optical bandgaps of CRIC and BRIC films estimated from the intersection of absorption and photoluminescence spectra were comparable, 1.50 eV and 1.48 eV, respectively. Meanwhile, grazing-incidence wide-angle X-ray scattering (GIWAXS) measurements revealed that BRIC has the higher tendency for the formation of the face-on-oriented packing structures in its film than CRIC. In addition, the π - π distance in the BRIC film (3.65 Å) is shorter than that in the CRIC film (4.03 Å), indicating that the fused-ring structure with higher planarity in BRIC enhances the π - π stacking.

Keywords : Nonfullerene Acceptor; Quinoxaline; Organic Photovoltaics; Conjugated Polymers

電子不足コアユニット (A') としてキノキサリン (Qx) 骨格を用い、電子豊富ユニット (D) にジチエノシクロペンタジエン、末端電子不足ユニット (A) にジフルオロ化された 1,1-ジシアノメチレン-3-インダノンを含む新規 A-D-A'-D-A 型非縮環非フラレーンアクセプター CRIC および BRIC (図 1) を設計し、合成した。CRIC では、Qx の 2 位および 3 位がフェニル置換されており、BRIC ではその 2 つのフェニル基が縮環した構造を有する。CRIC および BRIC の薄膜は、ともに可視から近赤外領域に幅広い吸収帯を有し、近赤外領域に強い発光を示した。薄膜での吸収と発光スペクトルの交点から見積もられる光学バンドギャップは、CRIC が 1.50 eV、BRIC が 1.48 eV であり、コアユニットの縮環の有無による大きな違いはないことがわかった。また、CRIC 薄膜の微小角入射広角 X 線散乱 (GIWAXS) 測定を行ったところ、面外方向における face-on 配向に由来する (010) 面のブロードなピークが 1.56 Å^{-1} (面間隔 4.03 Å) に観察された。一方で BRIC 薄膜はよりシャープなピークを 1.72 Å^{-1} (面間隔 3.65 Å) に示した (図 2)。BRIC コアユニットの高い平面性により分子間相互作用が強くなったことで、face-on 配向性が高くなり、面間距離が短くなったと考えられる。

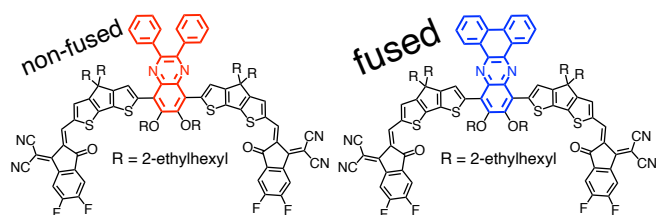


図 1 CRIC (左) と BRIC (右) の構造

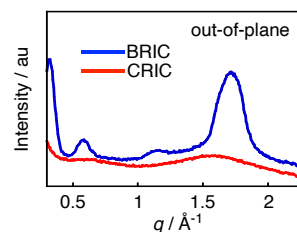


図 2 BRIC、CRIC の GIWAXS