

ハロゲン-ハロゲン相互作用を活用した二置換型非対称有機半導体材料における分子配向制御

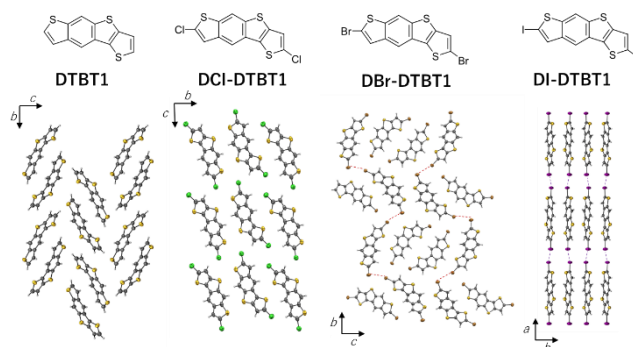
(山形大院有機¹・山形大院理工²) ○蓮見 翔¹・松永 周²・片桐 洋史^{1,2}

Molecular Orientation Control in Disubstituted Asymmetric Organic Semiconductor Materials Using Halogen-Halogen Interaction (¹Graduate School of Organic Materials Science Yamagata University, ²Graduate School of Science and Engineering Yamagata University)
○Kakeru Hasumi,¹ Amane Matunaga,² Hiroshi Katagiri^{1,2}

Controlling the ordered molecular orientation of organic semiconductor molecules in the active layer is essential for improving the performance of organic field-effect transistors (OFETs). We have previously reported that iodinated thienoacene derivatives exhibit molecular orientations favorable for charge transport through iodine-iodine interactions¹. In this study, we investigated the structure and physical properties of disubstituted diiodo (DI-DTBT1), dibromo (DBr-DTBT1), and dichloro (DCI-DTBT1) derivatives to systematically understand the effect of halogen species on the formation of molecular assemblies. DI-DTBT1 formed linear Type I halogen interactions and showed a layered herringbone structure favorable for charge transport, whereas DBr-DTBT1 formed bent Type II halogen interactions, and no halogen interactions were observed in DCI-DTBT1. These results demonstrate that iodine exhibits the most effective halogen interactions and is advantageous for forming crystal structures conducive to charge transport.

Keywords : Organic Field-Effect Transistor, Halogen-Halogen Interactions, Herringbone Structure, Thienoacenes, Charge transport

有機電界効果トランジスタ(OFET)の性能向上には、活性層での有機半導体分子の秩序的な配列制御が不可欠である。我々はこれまでに、ヨウ素化チエノアセン誘導体がヨウ素-ヨウ素相互作用を介して電荷輸送に適した分子配向を示すことを報告している¹。本研究では、ハロゲン種が分子集合体形成に与える影響を系統的に理解するため、二置換型のジヨード体(DI-DTBT1)、ジブロモ体(DBr-DTBT1)、ジクロロ体(DCI-DTBT1)の構造と物性を評価した。その結果、DI-DTBT1は直線的なType Iのハロゲン相互作用を形成し、電荷輸送に有利な層状へリンボーン構造を示した。一方、DBr-DTBT1は屈曲したType IIのハロゲン相互作用を形成し、DCI-DTBT1ではハロゲン相互作用は確認されなかった。本結果は、ヨウ素が最も効果的なハロゲン相互作用を示し、高効率な電荷輸送に適した結晶構造の形成に寄与することを示している。



1) A. Matsunaga *et al.*, *J. Phys. Chem. Lett.* **2021**, *12*, 111–116.