

交差共役型 γ -チオラク톤を電子受容性部位とする ADA'DA 型 π 電子系の合成と物性

(京大院工¹・京大 iCeMS²) ○下ノ原 優斗¹・塩川 拓実¹・深澤 愛子²

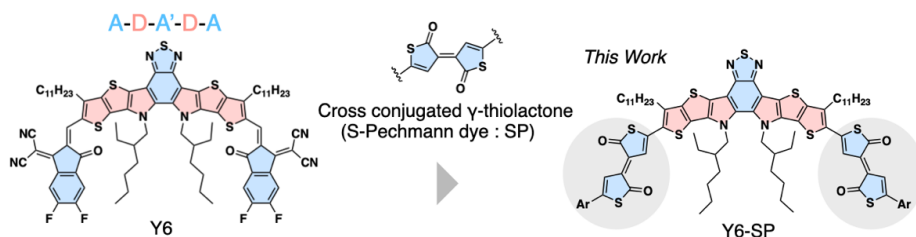
The Synthesis and Properties of an ADA'DA-Type π -Electron System with a Cross-Conjugated γ -Thiolactone as the Electron-Accepting Unit.

(¹Graduate School of Engineering, Kyoto University, ²WPI-iCeMS, Kyoto University) ○Yuto Shimonohara,¹ Takumi Shiokawa,¹ Aiko Fukazawa²

Non-fullerene acceptors (NFA) are crucial for enhancing the performance of organic photovoltaics. While research on ADA'DA-type π -electron systems with electron acceptors (A) and donors (D) has gained significant attention, current studies are largely limited to Y6 and its terminal acceptor units are limited to an indanone substructure, highlighting the need to explore a broader chemical space for superior NFAs. In this study, we investigated cross-conjugated γ -thiolactone (S-Pechmann dye), which exhibits strong electron-accepting character comparable to the indanone moiety while enabling strong π -stacking interactions. Building on these characteristics, we synthesized a novel ADA'DA-type π -conjugated compound, Y6-SP, featuring cross-conjugated γ -thiolactone at both ends. This presentation will highlight the properties of Y6-SP and its potential as an NFA in organic photovoltaics.

Keywords: organic photovoltaics; non-fullerene acceptor; thiolactone; π -conjugated compound; electron acceptor

非フラーレンアクセプター (NFA) は有機薄膜太陽電池の性能向上の鍵であり、電子受容体 (A) と電子供与体 (D) を組み合わせた ADA'DA 型 π 電子系を用いて構造-物性相関の研究が盛んに行われている。しかしながら、NFA の開発研究の対象は、現在のベンチマーク化合物である Y6^[1] やその誘導体を中心とする一部の分子群に集中しており、分子構造の必然性には依然として不明な点が多い。特に、末端アクセプター部位はインダノン骨格に限定されており、より優れた NFA の探索に向けて物質探索空間の拡大が望まれている。このような背景のもと我々は、独自に開発した交差共役型 γ -チオラク톤 (S-ペックマン色素)^[2] がインダノン骨格に匹敵する電子受容性や強い π スタッキングの形成能をもつことに着目し、本骨格を両端にもつ新規 ADA'DA 型 π 共役化合物 Y6-SP を合成した。本発表では、Y6-SP の基礎物性に加え、有機薄膜太陽電池の NFA としての検討結果も発表する予定である。



[1] Y. Zou *et al.* *Joule* **2019**, 3, 1140. [2] (a) A. Fukazawa *et al.* *Chem. Commun.* **2013**, 49, 7117. (b) A. Fukazawa, I. Osaka *et al.* *Chem. Mater.* **2021**, 33, 8183.