

分岐アルキル鎖によって制御される分子集合および分子材料機能

(物材機構) ○中西尚志・Babu Sukumaran Santhosh

有機分子・高分子を基材とするエレクトロニクス材料創製において、分子の組織化構造、配向制御がデバイス性能向上において最も重要な要因の一つとされている。また、溶液プロセスからの大面積コーティングには、分子素材の溶解性向上が求められ、電子・光機能を司る π 共役部位にアルキル鎖などの側鎖を導入する手法が採られる。直鎖状のアルキル基の導入例としては、フラーレン (C_{60}) 誘導体における自己組織化制御とその光・電子機能開発などが知られている^[1a]。

一方、フレキシブルデバイス創製においては、結晶性の高い組織配向構造は不向きであり、流動性のある柔らかい状態・相の光・電子活性層の応用が求められる。本目的に向けて、ここでは柔軟性の高い分岐アルキル鎖を導入した分子系の分子組織化制御、液晶、液体材料の創製、および光・電子機能の応用技術開発に取り組んだ。

C_{60} のフェニル置換基の(3,5)位に $2-C_6C_{10}$ (**1**) または $2-C_8C_{12}$ (**2**) の分岐アルキル鎖を導入した場合、ラメラ液晶相を形成するが、 $2-C_{10}C_{14}$ (**3**) および(2,5)位に $2-C_8C_{12}$ を導入した **4** では、室温で液体となった^[1b] (**Fig. 1a**)。講演時には、**2** を素材とする太陽電池性能に関しても言及する。一方、 $2-C_8C_{12}$ を導入したオリゴフェニレンビニレン (**5**)^[2a] やアントラセン (**6**)^[2b] は青色発光性の常温液体となり (**Fig. 1b**)、微量の色素添加による白色発光^[2a] やフルカラー発光^[2b] する液体材料の調製に成功した。講演時には、分子組織化制御の観点から議論を行う。

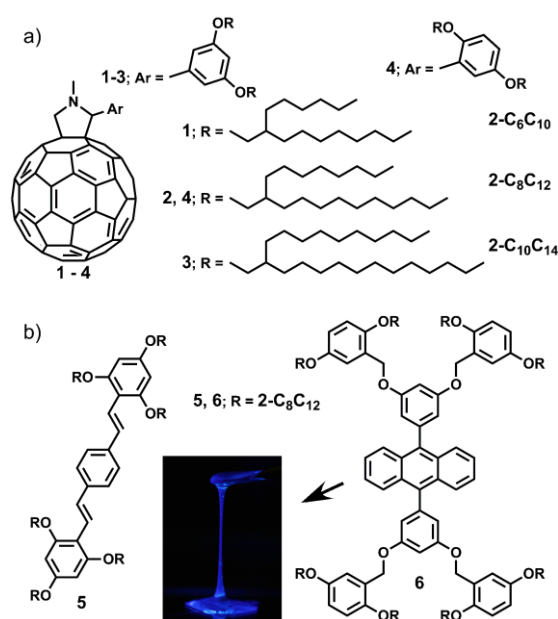


Fig. 1 Chemical structures employed in this study. a,b) **1** and **2** form thermotropic “liquid crystalline” phase, on the other hand **3-6** form nonvolatile, solvent-free, “liquid” state at room temperature. b) An image corresponds to a blue light emitting liquid **6** under UV irradiation.

【参考文献】

[1] a) *Langmuir* **2013**, 29, 5394 (Feature Article); b) *J. Mater. Chem. C* **2013**, 1, 1943 (Back Cover).

[2] a) *Angew. Chem. Int. Ed.* **2012**, 51, 3391 (Highlighted in *Nature* **2012**, 484, 9); b) *Nature Commun.* **2013**, 4, 1969.

Branched Alkyl Chain Controlled Molecular Assemblies and Molecular Materials Function

T. NAKANISHI, S. S. BABU (National Institute for Materials Science (NIMS), e-mail: NAKANISHI.Takashi@nims.go.jp)

The potency of branched alkyl side chain substituents in self-assemblies and organic molecular materials with optoelectronic applications is highlighted in this presentation. Attaching branched alkyl side chains to the polycyclic aromatic core can modulate its core-core (π - π) interactions and thus soften the material. This can lead to optimized assemblies with improved optoelectronic properties such as organic thin layer solar cell performance. Interestingly, by increasing the number and volume of the flexible and bulky side chains, individual π -conjugated cores can be isolated and can yield nonvolatile, solvent-free, room temperature molecular liquids with emphasized optical properties. These luminescent liquids can accommodate small dopants to offer diverse and tunable emission colors.