水中におけるシングレット・フィッション超分子の形成とスピン特性評価

（九大院工 [1]・九大院理 [2]・九大 CMS[3]・JST さきがけ [4]）○中島悠真 [1]・川嶋優介 [1]・藤原才也 [1]・田村徹 [2]・宮田潔志 [2]・恩田健 [2]・君塚信夫 [1,3]・楊井伸浩 [1,3,4]

Construction and Spin Characterization of Singlet Fission Supermolecules in Water

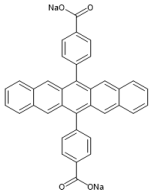
([1]*Grad. Sch. Eng., Kyushu Univ.*, [2]*Grad. Sch. Sci., Kyushu Univ.*, [3]*CMS, Kyushu Univ.*, [4]*PRESTO JST.*)
○Yuma Nakashima,[1] Yusuke Kawashima,[1] Saiya Fujiwara,[1] Tetsu Tamura,[2] Kiyoshi Miyata,[2] Ken Onda,[2] Nobuo Kimizuka,[1,3] Nobuhiro Yanai,[1,3,4]

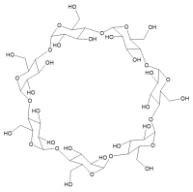
Singlet fiction (SF) is a process to generate two excited triplet states from a photo-excited singlet state. While it has been known that SF can produce spin-polarized triplets, there have been no examples of the utilization of these polarized triplets. In this study, we form host-guest complexes from pentacene derivatives and cyclodextrin in water and investigate SF and electron spin production behavior. In the presentation, we will also discuss the electron spin polarization properties in the supramolecular assemblies.

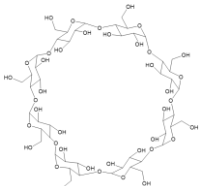
Keywords：Singlet Fission; Supramolecule; Pentacene; Cyclodextrin

シングレットフィッション（SF）では、１つの励起一重項から 2 つの励起三重項が生成される。SF によりスピン偏極した三重項が高い効率で生成されることが知られているが、その偏極スピンを活用して機能を発現した例はない。そこで本研究では、SF により生成した偏極三重項を超核偏極の偏極源として利用することを志向した。シクロデキストリン（CD）との超分子構造形成によりペンタセン誘導体の水中での集合状態の制御を行い、得られた超分子集合体中での SF と電子スピン生成の評価を行った。

カルボン酸部位を修飾したペンタセン誘導体（NaPDBA, Fig. 1）[1)]単体の水溶液と、NaPDBA に加えて β-CD または γ-CD を含む水溶液の分光学的評価を行ったところ、それぞれ NaPDBA の集合状態が異なることが示唆された。超高速過渡吸収測定の結果から、NaPDBA の集合状態の違いによって SF 特性が変化する挙動が見られた。当日は時間分解 ESR 測定よる電子スピン偏極の生成挙動とその活用についても報告する予定である。


NaPDBA


β - CD


γ - CD

1) S. Fujiwara. et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 46, 15606-15610.

© The Chemical Society of Japan