

フェロセンをリンカーとするペンタセン二量体の合成と分光特性

(慶大理工) ○早坂 稜・酒井 隼人・羽曾部 卓

Synthesis and Photophysical Properties of Ferrocene-Bridged Pentacene Dimers (*Fac. Sci. Tech., Keio Univ.*) ○Ryo Hayasaka, Hayato Sakai, Taku Hasobe

Pentacene demonstrates efficient multi-exciton generation process (i.e., singlet fission) in which two excitons are generated from the one-photon absorption in two neighboring molecules. Ferrocene is also well-known as not only an excellent electron donor, but also a rotational unit of cyclopentadienyl rings in the research field of molecular machines. In this study, to control the photophysical process of singlet fission associated with rotational motion of ferrocene unit, we synthesized a series of ferrocene-bridged pentacene dimers (Figure 1). The details of synthesis and structural and photophysical properties will be discussed in this presentation.

Keywords : *Pentacene; Ferrocene; Singlet Fission*

一重項分裂 (SF) とは、近接する二つの分子において、光励起された最低励起一重項状態 (S_1) が、もう一方の基底状態 (S_0) と相互作用し、強相関の三重項対 (TT) を経由して二つの独立した三重項励起状態 (T_1+T_1) を生成する光物理過程である。^[1] 近年、我々は、フェニル (Ph) 基をリンカーとする一連のペンタセン (Pc) ダイマーにおいて、TT から T_1+T_1 への開裂過程における構造変化を観測している。^[2] 一方、フェロセン (Fc) はシクロペンタジエニル環が分子軸周りに自由回転可能であるため、分子機械における回転素子として利用が多数報告されている。^[3] そこで、上述の TT 解離過程における構造変化と Fc の回転運動の関連に着眼した分子設計を行った。本研究では、Fc と Pc を n 個 ($n = 0-3$) の Ph 基を介して結合した Fc-(Ph n -Pc)₂ および参照化合物 Fc-Ph n -Pc を合成し、各化合物の Fc-Pc 間の距離に依存した光物理過程の制御を検討した (図 1)。 n の増大に従い、重原子効果による項間交差が抑制され、SF の発現が確認された。本発表では、各化合物の合成と分光特性について議論する。

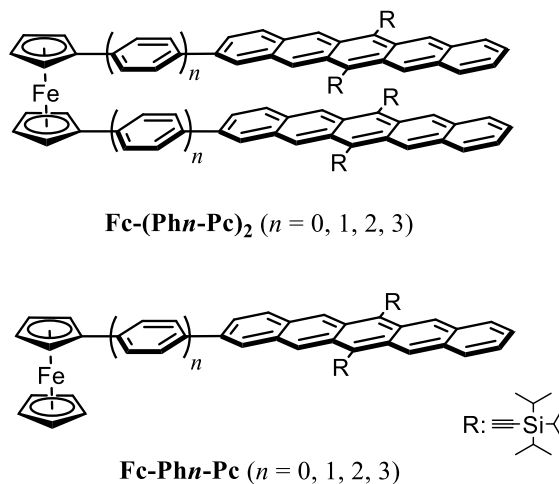


図 1 本研究で用いる化合物の化学構造

[1] Toshiyuki, S.; Sakai, H.; Nagashima, H.; Kobori, Y.; Tkachenko, N. V.; Hasobe, T. *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 14720-14727.

[2] Kobori, Y.; Fuki, M.; Nakamura, S.; Hasobe, T. *J. Phys. Chem. B* **2020**, *124*, 9411-9419.

[3] Muraoka, T.; Kinbara, K.; Aida, T. *Nature* **2006**, *440*, 512-515.