

四重水素結合部位を有するペンタセン誘導体の合成と会合特性

(慶大理工) ○小池 直樹・中村 俊太・酒井 隼人・羽曾部 卓

Synthesis and Aggregate Properties of Pentacene Derivatives Bearing Quadruple Hydrogen Bonding Units (*Fac. Sci. Tech., Keio Univ.*) ○Naoki Koike, Shunta Nakamura, Hayato Sakai, Taku Hasobe

Singlet fission (SF) is a spin-allowed photophysical process where two triplet excitons are generated from one-photon absorption between two nearby molecules. Most SF systems in homogeneous solutions have been observed by utilizing covalently-linked acene dimers, which enable to control the appropriate intermolecular interactions of two chromophores. In this work, we focus on the molecular organization by the non-covalent hydrogen bond and newly synthesized a series of pentacene derivatives with quadruple hydrogen bonding sites. In this presentation, we report the synthesis and spectroscopic properties together with aggregate forms.

Keywords : *Singlet Fission; Pentacene; Quadruple Hydrogen Bond*

分子集合体の形成において合成的な煩雑さを伴う共有結合に対し、水素結合は自発的に集合化するためメゾ・マクロなスケールへの展開が容易である。水素結合の問題として相対的に弱い結合力が挙げられるが、近年では会合定数が 10^7 M^{-1} を超える強力な四重水素結合が報告されている¹。一方、一重項分裂 (Singlet Fission : SF) とは、光励起によって生じた 1 つの最低励起一重項状態の分子が近傍に存在する基底状態の分子と相互作用し、2 つの最低励起三重項状態を生成する光物理過程である。均一溶液中での SF の報告例の多くは共有結合による二量体であり²、水素結合などの非共有結合を利用した例は限られている。特に、強固な四重水素結合を用いた例はない。そこで本研究では、以下の図 1 に示す四重水素結合部位を持つペンタセン HBUBnPc および異なるリンカー鎖長を有する各種誘導体を合成した。¹H NMR の測定から水素結合が確認され、その会合定数が $9.5 \times 10^5 \text{ M}^{-1}$ 以上であると算出された。本発表では合成と会合状態における分光特性について報告する。

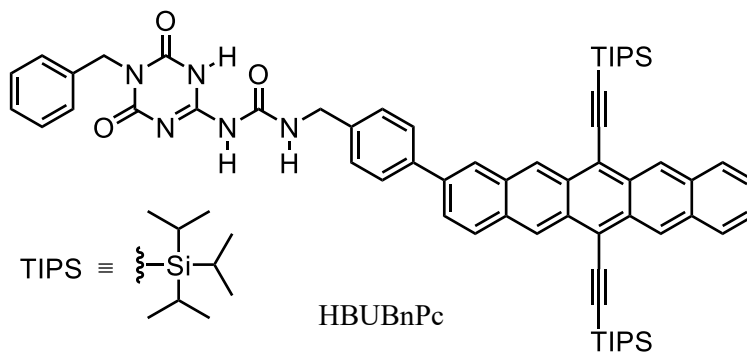


図 1 本研究で用いるペンタセン誘導体の化学構造の一例

参考文献

- 1) Kheria, S.; Rayavarapu, S.; Kotmale, A. S.; Gonnade, R. G.; Sanjayan, G. J. *Chem. Eur. J.* **2017**, *23*, 783.
- 2) Nakamura, S.; Sakai, H.; Nagashima, H.; Kobori, Y.; Tkachenko, N. V.; Hasobe, T. *ACS Energy Lett.* **2019**, *4*, 26.