一重項分裂発現をめざした高次アセン誘導体の合成と光物性

（慶大理工 [1]）○岡本 大河 [1]・中村 俊太 [1]・酒井 隼人 [1]・羽曾部 卓 [1]

Synthesis and Photophysical Properties of Higher Acene Derivatives for Singlet Fission

([1]*Faculty of Science and Technology, Keio University*) ○Taiga Okamoto,[1] Shunta Nakamura,[1] Hayato Sakai,[1] Taku Hasobe[1]

Singlet fission (SF) is a photophysical process, in which two triplet excitons are generated from one-photon absorption in two neighboring molecules. Acenes have attracted attention as a representative molecule capable of the occurrence of SF. Highly efficient SF systems composed of pentacene and tetracene have been reported so far. In contrast, a limited number of SF systems using higher acenes such as hexacene have been reported. Especially, there is no report of SF using heptacene. In this study, we synthesized a series of higher acene derivatives for the occurrence of SF and evaluated the photophysical properties.

Keywords : Singlet Fission; Higher Acenes; Photophysical Properties

一重項分裂 (SF) とは、近接した二分子間において、一光子を吸収した最低励起一重項状態が近傍に存在する基底状態分子と強く相関した三重項対を形成し、開裂して 2 つの独立した励起三重項状態を生成する光物理過程である。近年の SF の研究例では、芳香環の数が 4 つのテトラセン及び 5 つのペンタセンが広く用いられているのに対し、6 つ以上の高次アセンでは、化合物の安定性や合成の困難さから報告例が極めて限られている。一方、最近、当研究室では、フェニル基をリンカーとしたヘキサセン二量体において高効率 SF の進行による長寿命な三重項励起子の生成を初めて観測した [1, 2]。しかしながら、より π共役系を拡張した高次アセン系における SF の報告例は未だ皆無である。

そこで本研究では、より π共役系を拡張した分子として電子吸引性置換基を導入したヘキサセン誘導体及びヘプタセン誘導体 (Fig. 1)を合成し、その基本的な光物性を評価した。ヘプタセン誘導体の合成は既報に従って行い [3]、電子吸引性ヘキサセン誘導体は現在合成中である。ヘプタセン誘導体の定常及び時間分解分光特性を評価し、ヘキサセン誘導体と比較する。

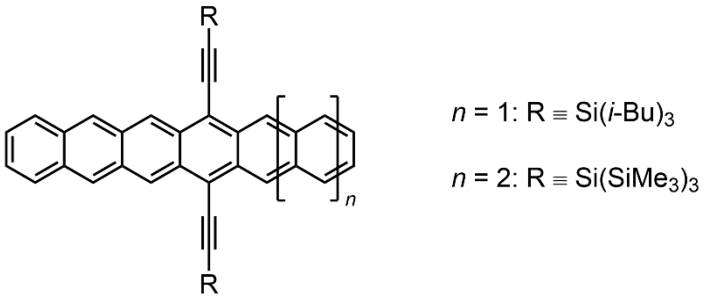

Fig. 1 ヘキサセン ($n = 1$) 及びヘプタセン ($n = 2$) の単量体の化学構造

1) S. Nakamura, H. Sakai, M. Fuki, Y. Kobori, N. V. Tkachenko, T. Hasobe, *J. Phys. Chem. Lett.* **2021**, *12*, 6457. 2) T. Hasobe, S. Nakamura, N. V. Tkachenko, Y. Kobori, *ACS Energy Lett.* **2022**, *7*, 390. 3) M. M. Payne, S. R. Parkin, J. E. Anthony, *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, *127*, 8028.

© The Chemical Society of Japan