## 構造を精密制御したテトラセンダイマーの光学特性評価

(¹九州大学, ²JST 創発) ○石井 航 ¹, 山内 朗生 ¹, 楊井 伸浩 ¹,² Evaluation of Optical Properties of Tetracene Dimers with Precisely Controlled Structures (¹ Kyushu university, ²JST-FOREST) ○Wataru, Ishii¹, Akio Yamauchi¹, Nobuhiro Yanai¹,²

Singlet fission (SF) has attracted much attention for the improvement of the photoelectronic conversion efficiency and the application to the quantum information science. Tetracene has been known to show SF and its reverse process, triplet-triplet annihilation (TTA), so studied actively as a benchmark molecule. Since these processes occur via the interaction between at least two tetracene, the precise control of dimer structure would be crucial for enhancing the energy and quantum outputs of SF. In this work, we report the synthesis and properties of a tetracene dimer with parallel orientation. Single crystal X-ray diffraction measurement revealed the parallel orientation between tetracene units. Intramolecular SF and TTA behaviors of the tetracene dimer was evaluated by optical and transient ESR measurements.

## Keywords: Tetracene dimer; Singlet fission; Triplet-triplet annihilation

2 励起子生成過程である singlet fission (SF) は太陽電池の光電変換効率向上や量子情報科学への応用などの観点から近年注目されている 1),2)。テトラセンは singlet fission とその逆過程である triplet-triplet annihilation (TTA) の両方を示すことが知られており、ベンチマーク分子として活発に研究されている。これらの過程は 2 つ以上のテトラセンの相互作用によって起こるため、精密に構造制御したダイマー構造が示す光物性に興味が持たれる。

本研究ではテトラセン同士がパラレルに配向した共有結合型ダイマーの合成に成功した (Fig. 1)。単結晶 X 線構造回折によりテトラセン間がパラレルに配向した構造であることを確認した。また 77 K での蛍光寿命測定により、モノマーに対してダイマーが長い遅延蛍光を示したことから、ダイマーの分子内で SF と TTA が起こることが示唆された。今回合成したテトラセンダイマーの時間分解吸収分光測定と時間分解ESR 測定の結果を基に分子内での SF と TTA のダイナミクスについて当日報告する予定である。

- 1) J. Michl et al., Chem. Rev. 2010, 110, 11, 6891-6936.
- 2) Joel. D. Eaves et al., Sci. Rep. 2020, 10, 18480.

Fig. 1 Schematic illustration of tetracene dimer with parallel interchromophore orientation.