

キラルアセン二量体の分子内一重項分裂およびキロプティカル特性

(慶大理工¹・東北大多元研²・タンペレ大学³) ○酒井 隼人¹・荒木 保幸²・和田 健彦²・Nikolai V. Tkachenko³・羽曾部 卓¹

Intramolecular Singlet Fission and Chiroptical Properties of Chiral Acene Dimers (¹*Department of Chemistry, Faculty of Science and Technology, Keio University*, ²*Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University*, ³*Faculty of Engineering and Natural Sciences, Tampere University*) ○Hayato Sakai,¹ Yasuyuki Araki,² Takehiko Wada,² Nikolai V. Tkachenko,³ Taku Hasobe¹

Singlet fission (SF) is able to generate two triplet excitons from one photon absorption between two neighboring chromophore units. Acene is one of the representative compounds for occurrence of efficient SF. Although various reports on the covalently-linked acene dimers with high-yield triplet excited states through SF are already published, the research number regarding the synthesis and observation of SF utilizing molecular dimers bridged by chiral linker units are quite limited. More importantly, no attention has been paid to the relationship between the chiroptic property and excited-state dynamics associated with SF, so far. In this study, we synthesized a series of acene (i.e., pentacene and tetracene) dimers bridged by chiral units. The details on the relationship between chiroptical and SF properties will be discussed in this presentation.

Keywords : Acene; Dimer; Chiroptical Property; Singlet Fission

一重項分裂 (SF) は、近隣する二分子間で一光子の吸収過程から二つの三重項励起子を生成する光物理過程であり、量子収率が最大 200%まで達するため高効率な光エネルギー変換系の構築が期待できる。SF の発現には、励起一重項状態のエネルギーが励起三重項状態のエネルギーの 2 倍以上のエネルギー条件を満たす必要がある。ペンタセン (Pc) やテトラセン (Tc) を代表とするアセンは、このエネルギー条件を満たすため SF 発現可能な分子群で、アセンを様々な架橋部位で連結した二量体で数多くの SF が観測されている。架橋部位にキラルユニットを用いた二量体に関して注目すると、SF に関する報告は二例あるが^{1,2}、SF の関与する励起状態とキロプティカル特性の関連は皆無である。

本発表では、キラル分子をリンカーとして用いた Pc および Tc の二量体を合成 (Fig. 1) し、キラル分光と過渡吸収分光を併用し、SF が関与するキロプティカル特性に関して評価した。

- 1) Lakhwani, G. et al., *J. Phys. Chem. A* **2021**, 125, 7226–7234
- 2) Guldi, D. M. et al., *ChemPhotoChem* **2020**, 4, 5168–5174

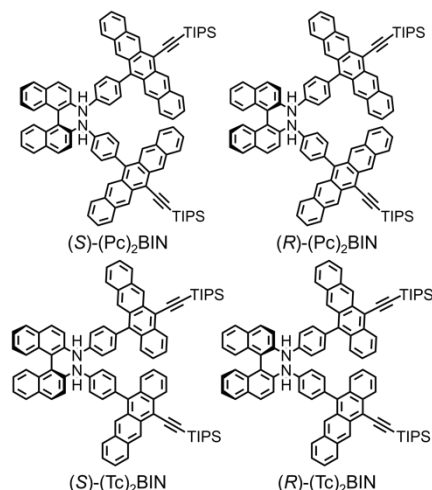


Fig. 1 Chemical structures of chiral acene dimers in this study.