ペンタセン二量体における一重項分裂の静水圧による動的制御

（東工大理[1]・慶應大理工[2]）○小川 凜太朗[1]・木下 智和[1]・酒井 隼人[2]・羽曾部 卓[2]・福原 学[1]

Dynamic Control of Singlet Fission in Pentacene Dimers by Hydrostatic Pressure ([1]*Department of Chemistry, Tokyo Institute of Technology*, [2]*Faculty of Science and Technology, Keio University*) ○Rintaro Ogawa,[1] Tomokazu Kinoshita,[1] Hayato Sakai,[2] Taku Hasobe,[2] Gaku Fukuhara[1]

We revealed that a biphenyl-linked pentacene dimer accelerated the correlated triplet pair formation (singlet fission process) and subsequently decreased the individual triplet quantum yield upon hydrostatic pressurization. In this study, we synthesized a novel pentacene dimer with a butane linker for the dynamic control purpose and revealed its mechanism under hydrostatic pressure as an external stimulus. The hydrostatically pressurized responses of the dimer will be discussed in the presentation.

Keywords : Singlet Fission, Hydrostatic Pressure, Pentacene

当研究室では、静水圧印加によるセンシングや物性制御についての研究を行っており[1]、一重項分裂を示すペンタセン二量体（Figure 1. (a)）において静水圧印加に伴う強相関三重項対生成過程の加速と三重項量子収率の低下が起きることを報告した[2]。

本研究では、静水圧を外部刺激とする一重項分裂の動的制御ならびに機構の解明を目的とした。溶液中での分子内一重項分裂において三重項を高収率で得るためには、構造の柔軟性が重要である[3]。これを満たす分子の候補として、ブタンをリンカーとするペンタセン二量体（Figure 1. (b)）を合成した。本発表では、静水圧下での分光測定によって得られた各化合物の静水圧応答及びそれらの結果から予想されるリンカー構造の影響について報告する。

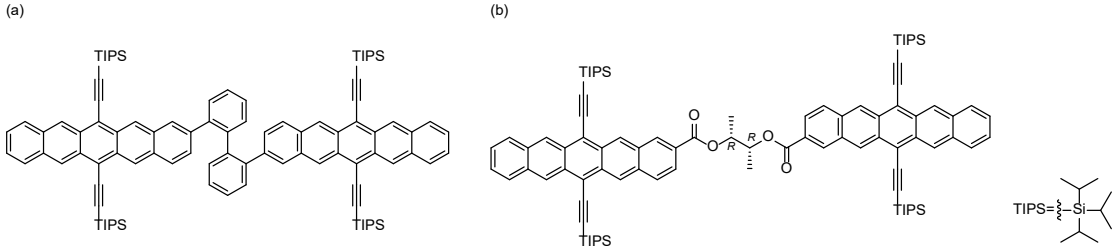

Figure 1. Chemical structures of pentacene-dimers with (a) biphenyl linker and (b) butane linker.

(1) Mizuno, H.; Fukuhara, G. *Acc. Chem. Res.* **2022**, *55*, 1748–1762.
(2) Kinoshita, T.; Nakamura, S.; Harada, M.; Hasobe, T.; Fukuhara, G. *submitted*.
(3) Hasobe, T.; Nakamura, S.; Tkachenko, N. V.; Kobori, Y. *ACS Energy Lett.* **2022**, *7*, 390–400.

© The Chemical Society of Japan