

サイクレンを中心骨格とする環状ペンタセン四量体の合成と光物理化学特性

(慶大理工¹) ○水野 しおん¹・酒井 隼人¹・羽曾部 卓¹

Synthesis and Photophysical Properties of Cyclen-Centered Cyclic Pentacene Tetramers (¹ *Fac. Sci. Tech. of Keio Univ.*) ○Shion Mizuno,¹ Hayato Sakai,¹ Taku Hasobe¹

Cyclens, nitrogen-containing cyclic molecules, are capable of regioselective molecular assembly with respect to nitrogen, and metal insertion allows control of physical properties associated with structural changes. Pentacene is a representative molecule that exhibits singlet fission (SF) in neighboring molecules. While many covalently-linked dimers and oligomers for SF have been reported, the number of cyclic molecular systems is quite limited. Moreover, the relationship between substitution position and SF properties in cyclic oligomers has not yet been reported. In this study, we synthesized a series of pentacene derivatives modified with cyclens and present their structural and spectroscopic properties. In transient absorption measurement, Ag⁺-inserted (*E*)-(TP)₂-Cy demonstrated efficient SF process. This is in sharp contrast with pristine (*E*)-(TP)₂-Cy without of insertion of Ag⁺.

Keywords : Singlet Fission; Cyclen

含窒素環状分子であるサイクレンは、窒素に対して分子修飾が可能であるため、立体位置選択的に分子集積が可能であり、さらには金属包接により構造変化に伴う物性の制御も可能となる¹。一方ペンタセンは、このような近接分子間で一重項分裂 (SF) という光現象を発現する代表分子である。共有結合による二量体や多量体の SF は多数報告されているが、環状化合物における報告例は未だ限られており、立体位置と SF 効率を関連づけた例という点では皆無である。そこで本研究ではペンタセンをサイクレンに立体位置選択的に修飾した一連の誘導体を合成し、分光特性を発表する。実際に、(*E*)-(TP)₂-Cy においては銀イオンの内包に伴い SF の進行が確認された。さらに、(TP)₄-Cy においては銀イオンを内包の有無にかかわらず良好な SF が観測された。本発表では SF の量子収率や反応速度についても議論する予定である。

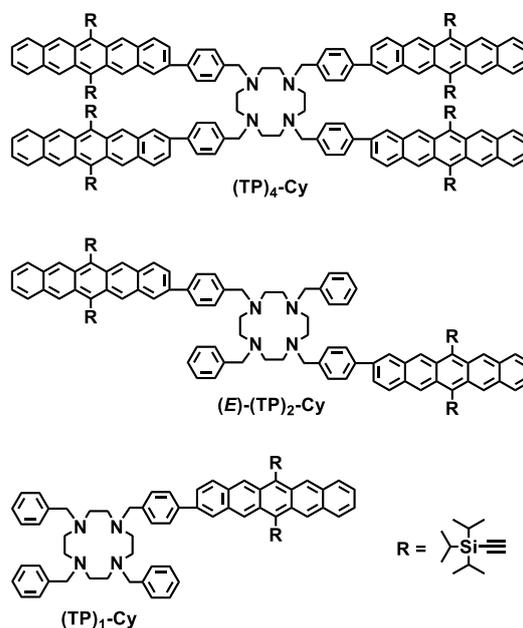


Fig. 1 Chemical structures of (TP)_n-Cy (n = 1, 2, 4)

1) Ju, H.; Taniguchi, A.; Kikukawa, K.; Horita, H.; Ikeda, M.; Kuwahara, S.; Habata, Y. *Inorg. Chem.* **2021**, *60*, 9141.