

ペンタセンドイマーの分子内一重項分裂における静水圧効果

(東工大理¹・慶大理工²) ○木下 智和¹・中村 俊太²・羽曾部 卓²・福原 学¹

Solution-State Hydrostatic Pressure Chemistry: Intramolecular Singlet Fission of Pentacene Dimers (¹*Department of Chemistry, Tokyo Institute of Technology*, ²*Faculty of Science and Technology, Keio University*) ○Tomokazu Kinoshita,¹ Shunta Nakamura,² Taku Hasobe,² Gaku Fukuhara¹

Photophysical and photochemical processes such as intramolecular singlet fission (SF) have attracted attention from the viewpoints of light energy conversion. Hydrostatic pressure as an external stimulus affects the excited-state processes with structural and solvation changes. In the present study, we wanted to control an intramolecular SF behavior of pentacene dimers upon hydrostatic pressurization. The hydrostatic pressure effects on the excited-state dynamics will be discussed.

Keywords : Hydrostatic-Pressure Spectroscopy; Intramolecular Singlet Fission; π -Conjugated Oligomers

一重項分裂 (SF) は太陽電池などへの応用が期待される光物理過程であり、溶液中での分子内 SF の研究においては、発色団間の距離、溶媒和や媒体の粘性に依存することが報告されている¹。近年、当研究室では溶液系において、静水圧によるコンフォメーション変化、溶媒和、分子内相互作用の変化に着目し、種々の感圧応答化学センサーの開発を行ってきた²。このような背景の基、本研究では新たな感圧応答化学センサーの構築を目的として、分子内 SF 過程に着目した。本発表では、ペンタセンドイマー (**Pc-BP-Pc**, Fig. 1) の静水圧分光分析から明らかになった各過程における詳細な静水圧効果について発表する。

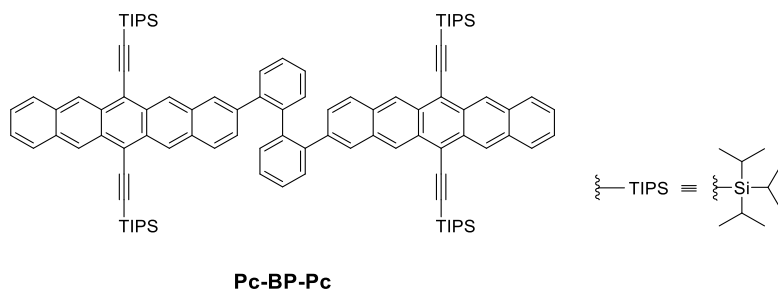


Figure 1. Chemical structure of biphenyl-linked pentacene dimer (**Pc-BP-Pc**).

- 1) (a) Zirzmeier, J.; Lehnher, D.; Coto, P. B.; Chernick, E. T.; Casillas, R.; Basel, B. S.; Thoss, M.; Tykwinski, R. R.; Guldi, D. M. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **2015**, *112*, 5325. (b) Sakuma, T.; Sakai, H.; Araki, Y.; Mori, T.; Wada, T.; Tkachenko, N. V.; Hasobe, T. *J. Phys. Chem. A* **2016**, *120*, 1867. (c) Sakai, H.; Inaya, R.; Nagashima, H.; Nakamura, S.; Kobori, Y.; Tkachenko, N. V.; Hasobe, T. *J. Phys. Chem. Lett.* **2018**, *9*, 3354.
- 2) (a) Takeda, Y.; Mizuno, H.; Okada, Y.; Okazaki, M.; Minakata, S.; Penfold, T.; Fukuhara, G. *ChemPhotoChem* **2019**, *3*, 1203. (b) Kinoshita, T.; Haketa, Y.; Maeda, H.; Fukuhara, G. *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 6691.