

フェロセンをリンカーとするペンタセン二量体の分子内一重項分裂

(慶大理工¹・タンペレ大²)

○早坂 稜¹・酒井 隼人¹・TKACHENKO, Nikolai²・羽曾部 卓¹

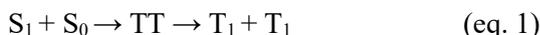
Intramolecular Singlet Fission of Ferrocene-Bridged Pentacene Dimers (¹Faculty of Science and Technology, Keio University, ²Faculty of Engineering and Natural Sciences, Tampere University)

○Ryo Hayasaka,¹ Hayato Sakai,¹ Nikolai Tkachenko,² Taku Hasobe¹

Ferrocene is well-known as not only an excellent electron donor, but also a rotational unit of cyclopentadienyl rings in the research field of molecular machines. Pentacene (Pc) also demonstrates efficient multi-exciton generation process (i.e., singlet fission) in which two triplet excitons are generated from the one-photon absorption in two neighboring molecules. In this study, to control the excited-state dynamics of singlet fission associated with rotational motion of ferrocene unit, we synthesized a series of ferrocene-bridged pentacene dimers and examined their excited state dynamics including structural properties.

Keywords : Singlet Fission, Pentacene, Ferrocene

一重項分裂 (Singlet Fission: SF) とは eq. 1 に示すように近接二分子間において光励起された励起一重項状態 (S_1) の分子と基底状態 (S_0) の分子が相互作用し、強相関の三重項対 (TT) を経由して、二つの励起三重項励起子 ($T_1 + T_1$) を生成する光物理過程である。^[1]



当研究室では分子間の配向や距離を制御したアセン二量体を用いて、SF による高効率および長寿命な三重項励起子の生成 ($TT \rightarrow T_1 + T_1$) を目的とした研究を行っている。最近では、フェニル基をリンカーとする一連のペンタセン (Pc) 二量体において、TT の解離前後の構造変化の重要性を明らかにしている。^[2] 一方、フェロセン (Fc) はシクロペンタジエニル環が分子軸周りに自由回転可能であるため、分子機械における回転素子として利用された例が多数報告されている。^[3] そこで本研究では上述の TT 解離過程における構造変化と Fc の回転運動を関連付けることに着目した分子設計を行った。具体的には Pc の分子骨格に可動部位 (Fc) を導入した種々の単量体および二量体を合成した (Fig. 1)。特に、Fc-Ph(2,3)-(Pc)₂ では Pc 間の立体障害の軽減と Fc の回転運動の効果により TT 解離が高効率化された。本発表では各化合物の詳細な分光特性について議論する。

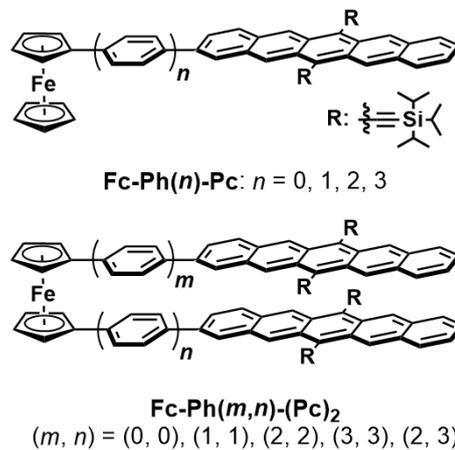


Fig. 1 本研究で用いる化合物

[1] Hasobe, T.; Nakamura, S.; Tkachenko, N. V.; Kobori, Y. *ACS Energy Lett.* **2022**, 7, 390.

[2] Kobori, Y.; Masaaki, F.; Nakamura, S.; Hasobe, T. *J. Phys. Chem. B*, **2020**, 124, 9411.

[3] Takai, A.; Yasuda, T.; Ishizuka, T.; Kojima, T.; Takeuchi, M. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, 125, 9337.