

## 長距離分子内一重項分裂を示すポリイン架橋ペンタセン二量体

(慶大理工<sup>1</sup>・神戸大分子フォト<sup>2</sup>・タンペレ大学<sup>3</sup>) ○酒井 隼人<sup>1</sup>・婦木 正明<sup>2</sup>・Tkachenko Nikolai<sup>3</sup>・小堀 康博<sup>2</sup>・羽曾部 卓<sup>1</sup>

Long-Range Intramolecular Singlet Fission in Polyene-Linked Pentacene Dimers (<sup>1</sup>Department of Chemistry, Faculty of Science and Technology, Keio University, <sup>2</sup>Kobe University, Molecular Photoscience Research Center, <sup>3</sup>Faculty of Engineering and Natural Sciences, Tampere University) ○ Hayato Sakai,<sup>1</sup> Masaaki Fuki,<sup>2</sup> Nikolai Tkachenko,<sup>3</sup> Yasuhiro Kobori,<sup>2</sup> Taku Hasobe<sup>1</sup>

Singlet Fission (SF) is a multi-exciton generation process that generates two individual triplet excitons from one-photon absorption. Many examples have been reported for covalently-linked molecular dimers because the close interaction between two chromophore units are required for occurrence of SF. In contrast, there is no observation of long-range intramolecular SF (ISF) at a spacer length of ca. 30 Å. Considering the previous reports of long-range photoinduced electron transfer, polyene is a good candidate for the useful spacer for long-range ISF. In this study, we newly synthesized a series of pentacene (Pc) dimers linked by polyene units with different spacer lengths and examined the detail photophysical processes such as the spacer length and solvent polarity-dependent rate constants.

**Keywords** : Pentacene; Dimer; Polyene; 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)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。一般に、SF 発現には、色素間の強い相互作用が必要なので、2つの色素の近接的な配置が必須である。したがって、分子内 SF はこれまでに色素間距離が 10 Å 以内もしくは同程度での二量体で数多く観測されており、色素間距離が 30 Å 程度におよぶ長距離で観測した例はない。一方、ポリインは、優れた分極性のπ-共役分子で長距離での色素間カップリングが可能なリンカーである。したがって、ポリインを介した共有結合で Pc 二分子を連結すると、従来にはない長距離での SF 発現が期待できる。本研究ではペンタセンを一連の鎖長が異なるポリインで架橋した二量体 (Fig. 1) を合成し、長距離分子内 SF の初観測に成功した。ポリインの鎖長依存性や溶媒効果についても報告する。

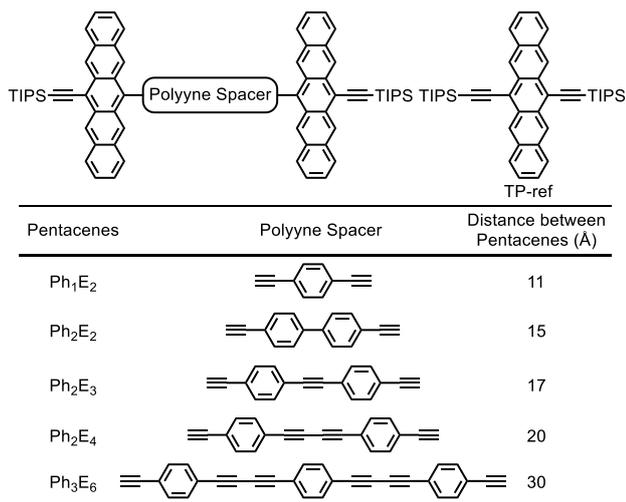


Fig. 1 Chemical structures of Pc dimers and the distances between two Pc units optimized by the B3LYP/6-31G level.