

アントラセン二量体の合成と分光特性

(慶大理工) ○早坂 稜・酒井 隼人・羽曾部 卓

Synthesis and Spectroscopic Properties of Anthracene Dimers (*Fac. Sci. Tech., Keio Univ.*)

○Ryo Hayasaka, Hayato Sakai, Taku Hasobe

Singlet fission (SF) is a photophysical process, in which two triplet excitons are generated from one photon absorption in two nearby molecules. Acenes have attracted attention as a representative molecule capable of occurrence of SF. In contrast with highly efficient SF systems composed of pentacene and tetracene derivatives, there are no reports on the occurrence of SF using anthracene derivatives in homogeneous solution. In this study, we synthesized a series of anthracene dimers and evaluated their structures and photophysical properties to examine the appropriate orientation between two nearby molecules for intramolecular SF.

Keywords : Singlet Fission, Anthracene, Spectroscopic Property

一重項分裂 (Singlet Fission: SF) とは近接二分子間において、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、二つの三重項励起子 ($T_1 + T_1$) を生成する多励起子生成過程である。^[1] SF の発現条件として S_1 のエネルギー $E(S_1)$ と T_1 のエネルギー $E(T_1)$ における $E(S_1) \geq 2E(T_1)$ の関係が挙げられる。ペンタセンやテトラセンはこの条件を満たしているため高効率 SF が多数報告されているのに対し、アントラセンは満たさないため二量体における SF の発現報告例は皆無である。そこで本研究では、アントラセン二量体における SF の発現に向けた最適な分子構造と配向構造の探索を目的として分子設計・合成および光物性評価を行った。

我々はアントラセンの誘導体である 9,10-ジフェニルエチルアントラセン (DPEA)^[2] に着目した。まず、Fig. 1 に示す DPEA-ref を用いて定常分光測定により $E(S_1) = 2.62$ eV および $E(T_1) = 1.37$ eV と決定した。この結果は DPEA 骨格が SF の発現条件を概ね満たし、SF 発現の可能性を示すものである。この DPEA を用いた SF の観測に向けて、フェニルリンカーにより異なる配向性を有する 3 種類の二量体を合成した (Fig. 1)。定常蛍光測定では、十分な蛍光の消光が観測されたことから分子内での二つの DPEA が関与する光物理過程の進行を確認した。本発表では各化合物の合成と分光特性について議論する。

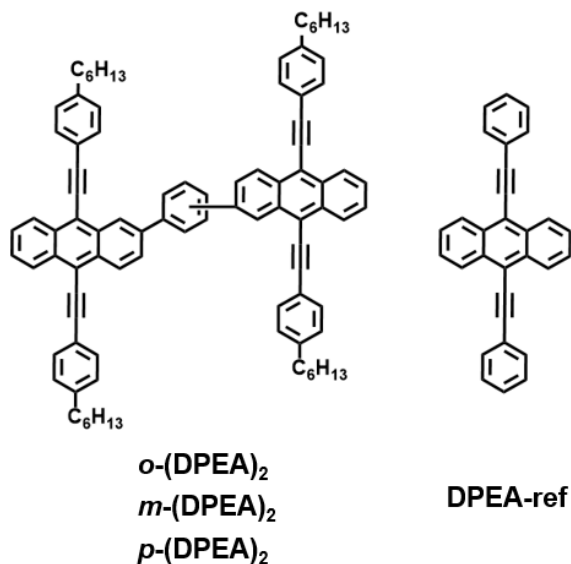


Fig. 1 本研究で用いる化合物

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

[2] Bae, Y. J.; Wasielewski, M. R. et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, 140, 15140.