

一重項分裂の発現をめざしたペリレン二量体の合成と光物性評価

(慶大理工) ○真保 遼子・酒井 隼人・羽曾部 卓

Syntheses and Photophysical Properties of Perylene Dimers for Singlet Fission (*Faculty of Science and Technology, Keio University*) ○Ryoko Shimbo, Hayato Sakai, Taku Hasobe

Singlet Fission (SF) is a multi-exciton generation process that produces two individual triplet excitons from one-photon absorption in two nearby chromophores. SF has been widely studied using acenes, whereas one of the serious problems is the extremely weak reduction properties of the triplet excited states due to the small excitation energies. In contrast, perylene has the relatively higher excitation energies and the stronger reduction properties of the triplet excited states. In this study, we synthesized a series of cofacial perylene dimers through xanthene linker with different electronic coupling between chromophores for occurrence of intramolecular SF and evaluated the photophysical properties.

Keywords : Singlet Fission; Perylene

一重項分裂 (Singlet Fission) とは、最低一重項励起状態 (S_1) の分子が近接する基底状態の分子と相互作用し、二つの最低三重項励起状態 (T_1) が生成する多励起子生成過程である¹⁾。SF 発現のエネルギー条件として、 S_1 のエネルギーが T_1 のエネルギーの 2 倍以上であることが挙げられる。複数のベンゼン環が直線状に縮環したアセン系分子はエネルギー条件をよく満たし、高効率な SF の発現が多数報告されている。しかしながら、縮環数の増加に伴って T_1 のエネルギーは低下し、その後の化学反応への利用が困難になる。一方、ベンゼン環が非直線状に縮環したペリレンはアセン系分子よりも高い T_1 のエネルギーを有し、 T_1 における還元力も高い。SF 発現に必須の S_1 と T_1 のエネルギー条件をおおむね満たすものの、競合するエキシマーの発現によって一重項分裂の報告例は数例に限られ、その収率も極めて低い²⁾。

そこで、本研究ではペリレン同士が向かい合う配向が可能なリンカーとして複数の候補を挙げ、まずはキサントゲンをリンカーとする二量体の合成に取り組んだ (Fig. 1)。スペーサー長を変化させることでペリレン間の相互作用を系統的な制御が期待される。現在、 $n=0,1$ の合成が完了し、スペーサーの長さが異なる二量体の合成を進めたのち、励起状態評価を行う予定である。

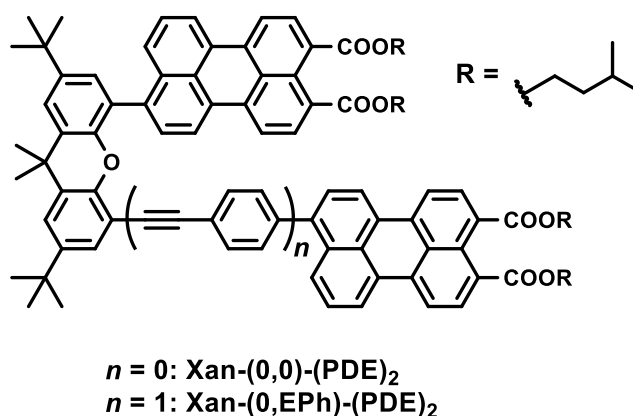


Fig. 1 本研究で合成済みの化合物構造

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

2) Korovina, N. V.; Chang, C. H.; Johnson, J. C. *Nat. Chem.* **2020**, 12, 391.