

## ジフェニルテトラセン発色団のキラル分子組織体におけるシングレットフィッシュン

○許 廷宇<sup>1</sup>、高塚 一瑛<sup>2</sup>、Ilias Papadopoulos<sup>2</sup>、高田 亜美<sup>3</sup>、久家 恵大<sup>2</sup>、宮田 潔志<sup>3</sup>、恩田 健<sup>3</sup>、佐々木 陽一<sup>2,4,5</sup>、君塚 信夫<sup>2,4</sup> (1. 九大工、2. 九大院工、3. 九大院理、4. 九大 CMS、5. JST ACT-X)

Singlet fission in chiral molecular assemblies composed of diphenyl tetracene chromophores (○Jeongwoo Hur<sup>1</sup>, Issa Takatsuka<sup>2</sup>, Ilias Papadopoulos<sup>2</sup>, Ami Takada<sup>3</sup>, Keita Kuge<sup>2</sup>, Kiyoshi Miyata<sup>3</sup>, Ken Onda<sup>3</sup>, Yoichi Sasaki<sup>2,4,5</sup>, Nobuo Kimizuka<sup>2,4</sup> (1. Fac. Eng., Kyushu Univ, 2. Grad. Sch. Eng., Kyushu Univ, 3. Grad. Sch. Sci., Kyushu Univ, 4. CMS, Kyushu Univ., 5. JST ACT-X)

Singlet fission (SF) is a photophysical process separating a single singlet exciton into two triplet excitons, potentially enabling highly efficient solar energy utilization. Efficient utilization of the SF process requires a controlled energy level of singlet and triplet ( $E_{S_1} > 2E_{T_1}$ ) electronic interaction among molecules to mix excited singlet and triplet pair states and molecular alignment for rapid triplet diffusion. In this study, to satisfy both conditions, we designed chiral SF active molecules with diphenyltetracene (DPT) core, and their SF properties were evaluated in the chiral assembly systems. Also, we synthesized achiral SF molecules as a control group to determine the effect of chirality.

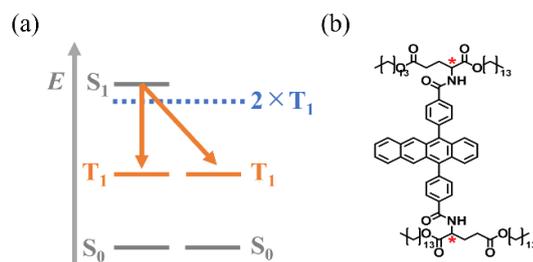
*Keywords* : Singlet Fission, Magnetic field effect, Transient absorption spectroscopy, Organized Molecular Assembly, Diphenyltetracene

シングレット・フィッシュン (SF) は、一つの一重項励起子 ( $S_1$ ) から二つの三重項励起子 ( $T_1$ ) を生じる多重励起子生成過程であり、太陽電池の効率向上に資するプロセスとして期待されている。SF を高効率化するためには、適切なエネルギー準位 ( $E_{S_1} > 2E_{T_1}$ ) を有する発色団の相対分子配向

を制御し、分子間に  $S_1$  状態と三重項対状態を混合する電子的な相互作用を持たせる必要がある。理論研究により、シリコン太陽電池の増感が期待できるジフェニルテトラセン (DPT) においてはツイストスタックした配置が高速な SF に適していると予想されているが<sup>1)</sup>、このような非対称な配置と SF 後の高速な三重項拡散に必要な長距離秩序を両立する分子設計として、我々はキラル分子組織化を提案している。<sup>2)</sup> 本研究では、DPT に水素結合能を有するキラルな長鎖グルタミン酸を親媒部として共有結合的に導入し、キラル自己組織化と SF 特性の関係を調べた。

1) W. Mou et al., *Appl. Phys. Lett.*, **2013**, *102*, 173301.

2) I. Papadopoulos and N. Kimizuka et al., *Adv. Sci.*, **2024**, *11*, 2405864.



**Fig. 1** (a) SF のエネルギーダイアグラムと (b) キラルな DPT 誘導体の化学構造