

## 光前駆体法を用いたヘプタセン誘導体の合成と光物性

(京大化研<sup>1</sup>・慶應大理工<sup>2</sup>・NIMS<sup>3</sup>) ○鈴木 慎二郎<sup>1</sup>・酒井隼人<sup>2</sup>・山内光陽<sup>1</sup>・林宏暢<sup>3</sup>・水畑吉行<sup>1</sup>・羽曾部卓<sup>2</sup>・山田容子<sup>1</sup>

Synthesis of a heptacene derivative using photoprecursor approach to investigate its photophysical properties (*Institute of Chemical Research, Kyoto University, <sup>2</sup>Faculty of Sciences and Engineering, Keio University, <sup>3</sup>National Institute for Materials Science*)

○Shinjiro Suzuki<sup>1</sup>, Hayato Sakai<sup>2</sup>, Mitsuaki Yamauchi<sup>1</sup>, Hironobu Hayashi<sup>3</sup>, Yoshiyuki Mizuhata<sup>1</sup>, Taku Hasobe<sup>2</sup>, Hiroko Yamada<sup>1</sup>

Heptacene, a molecule consisting of seven benzene rings linearly fused, is predicted by Clar's rule to have low stability. Consequently, even fundamental properties such as its optical characteristics and exciton dynamics remain poorly understood. Singlet fission, which has been studied in higher acenes like pentacene, has not been observed in heptacene either.

In this study, we successfully synthesized a stable photoprecursor of a heptacene derivative with bulky substituents. This allowed us to measure the transient absorption spectra, observe singlet fission, and track the excited-state dynamics of the heptacene derivative for the first time.

**Keywords :** Photoreaction, Heptacene, Singlet Fission, Precursor Approach, Photoprecursor

7つのベンゼン環が直線状に連結したヘプタセンは、Clar 則から予測される通り安定性が低く、光学特性や励起子ダイナミクスといった基本物性ですら実験的には未解明の点が多い化合物である。ペンタセンに代表されるアセン類で観測されている一重項励起子分裂現象に関しても、ヘプタセンでの観測は達成されていない。

本研究では、従来用いられてきた、嵩だかい置換基の導入による安定化、及び安定な光前駆体からの光変換反応という異なった二つのアプローチによるヘプタセンの合成戦略を組み合わせることで、溶液中においてヘプタセン誘導体を合成し、NMRにより確認した。さらに、光前駆体からの変換後に速やかに実験を行うことで、ヘプタセン誘導体の定常分光スペクトルだけでなく、過渡吸収スペクトルの測定にも成功した。

本発表では、ヘプタセン誘導体の励起子ダイナミクスの追跡と一重項励起子分裂現象の観測を達成したので、それらについて報告する。

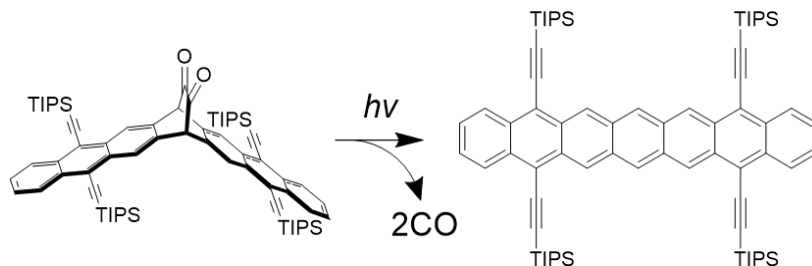


Figure 1. photoconversion of the heptacene derivative with TIPS-ethynyl groups