

## 時間分解 EPR 法を用いた分子内一重項励起子分裂の機構解析

(神戸大院理<sup>1</sup>・神戸大分子フォト<sup>2</sup>・慶応大理工<sup>3</sup>) ○田中 雅大<sup>1</sup>・婦木 正明<sup>1,2</sup>・中村 俊太<sup>3</sup>・酒井 隼人<sup>3</sup>・羽曾部 卓<sup>3</sup>・小堀 康博<sup>1,2</sup>

Analysis of Intramolecular Singlet Fission Mechanism by Time-Resolved EPR (<sup>1</sup>Graduate School of Science, Kobe University, <sup>2</sup>Molecular Photoscience Research Center, Kobe University, <sup>3</sup>Department of Chemistry, Faculty of Science and Technology, Keio University) ○ Masahiro Tanaka,<sup>1</sup> Masaaki Fuki,<sup>1,2</sup> Shunta Nakamura,<sup>3</sup> Hayato Sakai,<sup>3</sup> Taku Hasobe,<sup>3</sup> Yasuhiro Kobori<sup>1,2</sup>

Singlet fission (SF) is a phenomenon in which one singlet exciton interacts with a ground-state molecule to produce two triplet excitons. The multiple excitons produced in this process are expected to be applied to quantum sensing and computing by using four electron spins as qubits. In this study, we analyzed the dissociation mechanism of multiple excitons by time-resolved electron paramagnetic resonance (TREPR) for tetracene oligomer TcF<sub>3</sub>-(Tc)<sub>4</sub>-TcF<sub>3</sub>, which has been reported as an example of intramolecular SF<sup>1</sup>.

As a result of TREPR measurements, quintet correlated multiexcitons <sup>5</sup>(TT) appear in the early time domain, and dissociated triplet exciton T+T appear in the late time domain. These signal patterns have been analyzed, and the reaction mechanism of SF has been discussed.

**Keywords :** Singlet Fission; Time-Resolved EPR; Quintet State

一重項励起子分裂(SF)は、単一の一重項励起子が基底状態分子との相互作用により、二つの三重項励起子を生成する現象である。この過程で生成する多重励起子は、四電子スピンを量子ビットとする量子センシングや量子コンピューティングへの応用が期待される。本研究では、分子内 SF の事例として報告されている<sup>1</sup>テトラセンオリゴマーTcF<sub>3</sub>-(Tc)<sub>4</sub>-TcF<sub>3</sub>について、時間分解電子常磁性共鳴(TREPR)法を用いることで多重励起子の解離機構の解析を行った。

TREPR 測定の結果から、早い時間領域に五重項性の相関多重励起子 <sup>5</sup>(TT)が現れ、遅い時間領域に解離した三重項励起子 T+T が現れた。これらの信号パターンについて解析を行い、SF の反応機構について議論する。

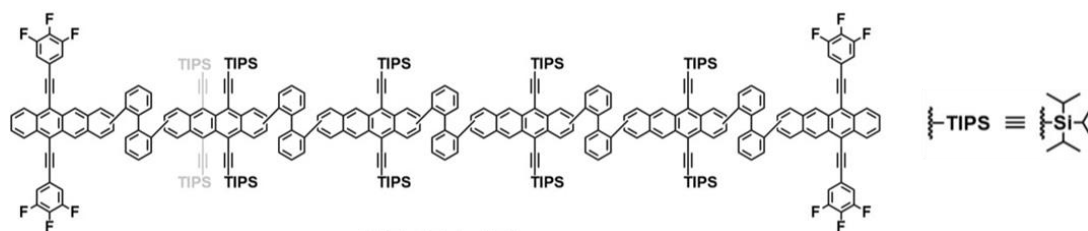


Fig. 1 Chemical structure of TcF<sub>3</sub>-(Tc)<sub>4</sub>-TcF<sub>3</sub>.

1) S. Nakamura, H. Sakai, M. Fuki, R. Ooie, F. Ishiwari, A. Saeki, N. V. Tkachenko, Y. Kobori, T. Hasobe, Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202217704.