

A3-04 水圏機能材料の励起ダイナミクス制御

羽曾部卓（慶大理工）

水が関与する分子集合体の研究は物質・エネルギー変換から薬剤・治療まで幅広い領域を網羅する。他の有機溶媒とは異なり、水は反応場形成の媒体や運び手だけでなく、化学反応における電子源など複数の役割を同時に担える特異な溶媒である。水中の分子集合体の報告例は数多くあるものの、その材料開発は水への溶解性等の問題で未だ発展途上にある。一方、分子集合体における光励起過程では励起エネルギーの迅速かつ大幅な消滅という重大な問題点が残されている。したがって、複数分子の会合形成に伴う光機能発現を水中で実現できれば、光励起による多方面への技術革新に繋がる。

本研究では水中での凝集状態の活用で水と光エネルギーが共生可能な材料開発を行うことを目的として、有機材料の多励起子生成反応である一重項分裂 (singlet fission: SF) に着目している。SF とは近接する二分子間での一光子の吸収過程 ($S_1 + S_0$) から強相関の三重項励起子対 (TT) を介して独立した二つの三重項励起子 ($T_1 + T_1$) が生成するスピン許容な多励起子生成過程であり、励起子の生成効率は最大 200% となる (式 1)。¹⁾



SF を発現するには、近接する二分子間の会合体形成だけでなく、エネルギー保存の観点から最低励起一重項状態 (S_1) のエネルギー $E(S_1)$ が最低励起三重項状態 (T_1) のエネルギー $E(T_1)$ の 2 倍程度もしくはそれ以上であるエネルギー適合条件 $E(S_1) \geq 2E(T_1)$ を満たす必要がある。この条件を満たす分子としてペンタセンをはじめとするアセン系分子が知られているが、一般に水への溶解性や水中での分散性は極めて乏しい。我々は水溶性ペンタセン²⁾ (Fig. 1) や水中での分子カプセル³⁾を用いることでペンタセンを用いた水中での SF 観測に成功した。本発表ではその詳細だけでなく、今後の光エネルギー変換への展開についても触れる予定である。

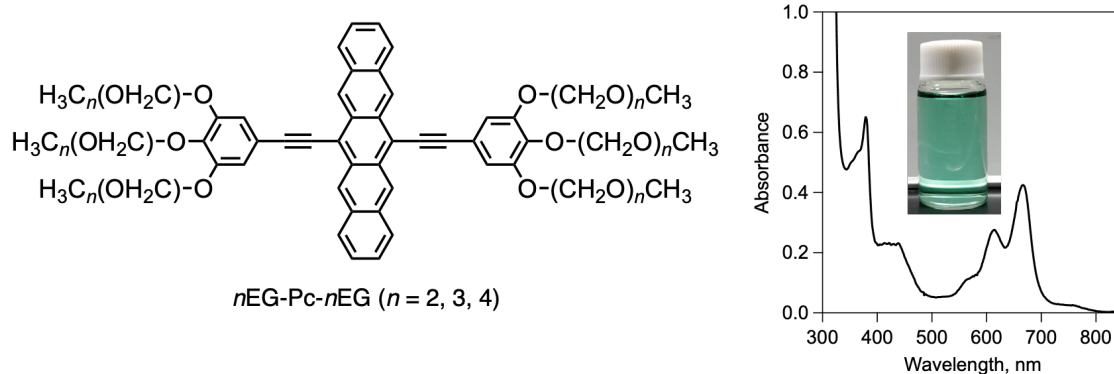


Fig. 1. Chemical structures of hydrophilic pentacenes (left) and absorption spectrum in H₂O (right).

- 1) T. Hasobe, S. Nakamura, N. V. Tkachenko, Y. Kobori, *ACS Energy Lett.* **2022**, 7, 390.
- 2) K. Yoshino, H. Sakai, Y. Shoji, T. Kajitani, H. Anetai, T. Akutagawa, T. Fukushima, N. V. Tkachenko, T. Hasobe, *J. Phys. Chem. B* **2020**, 124, 11910.
- 3) L. Catti, H. Narita, Y. Tanaka, H. Sakai, T. Hasobe, N. V. Tkachenko, M. Yoshizawa, *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, 143, 9361.

PROFILE

羽曾部卓（慶應義塾大学工学部化学科 教授）

2004年大阪大学大学院工学研究科博士後期課程を修了し、その後米国ノートルダム大学 Notre Dame Radiation Laboratory 博士研究員を経て2005年にJAIST助教、2006年より同講師。2010年より慶應義塾大学工学部准教授、2020年より現職。主な受賞歴は2009年PCCP Prize、2010年文部科学大臣表彰若手科学者賞、2014年SPP-JPP Young Investigator Awards。最近の主な研究内容は光エネルギー変換を指向した機能性分子材料の合成および時間分解レーザー分光による物性評価である。