

Title	高効率光エネルギー変換系構築を指向した両親媒性ペンタセン誘導体の合成
Sub Title	Synthesis of amphipathic pentacenes for solar energy conversion
Author	羽曾部, 卓(Hasobe, Taku)
Publisher	慶應義塾大学
Publication year	2018
Jtitle	学事振興資金研究成果実績報告書 (2017.)
Abstract	<p>ペンタセンはベンゼン環が五つ直線状に縮環した平面構造を持つ化合物であり、可視領域に幅広い吸収能と高いキャリア移動度を持つ代表的な有機半導体材料である。また、近年では、会合状態で一重項分裂(SF)という最低励起一重項状態(S1)が中間状態を経て二つの三重項励起状態(T1)を生成する特異な光物理過程を発現することが多数報告されている。しかしながら、ペンタセンの合成変換は比較的困難であることから、上述の物性の評価は固体もしくは溶液中における報告に限られている。そこで、本研究では親水および疎水相互作用を利用した中空を有するナノチューブ構造の構築をめざし、ペンタセンの6,13位にそれぞれ疎水基と親水基を導入した両親媒性ペンタセン誘導体を合成した。また、関連するペンタセン誘導体や参照化合物も合成し、超分子集合体の作製と一重項分裂や電子/エネルギー移動などの光物性評価を行った。両親媒性ペンタセン誘導体(計5種類)の合成はペンタキノンを出発原料として、菌頭カップリングを用いて疎水基(アルキル)と親水基(エチレングリコール)をそれぞれ逐次導入した後、塩化スズで酸化縮環することで達成した。親水基もしくは疎水基のみのペンタセンだけでなく、カルボキシル基やアルカンチオール鎖を有するペンタセンの合成も行い、有機-無機複合材料の展開も行った。親水性、疎水性および両親媒性のペンタセンはいずれも良好な分子集合体の構築が確認できた。特に、両親媒性のペンタセンではアスペクト比の極めて高いファイバー状の分子集合体の構築に成功した。一重項分裂やキャリア移動過程についてもそれぞれ確認でき、光および電子機能性分子集合体の構築に成功した。金属および半導体ナノ粒子に修飾したペンタセンについては一重項分裂のみならず電子/エネルギー移動などの光物理過程との共役についても成功した。</p> <p>Pentacene is one of representative organic semiconductor materials, which have efficient light-harvesting in the visible region as well as carrier transport properties. In addition, singlet fission, where one singlet exciton converts into the two triplet excitons, efficiently occurs in the dimeric and crystal forms. Thus, control of the internal structures of pentacene aggregates enables us to demonstrate the peculiar photophysical properties. In this work, we have reported on the first synthesis of amphipathic pentacenes substituted by both hydrophilic and hydrophobic chains at 6 and 13 positions together with the related pentacene derivatives. In all pentacene derivatives, the characteristic supramolecular formations were observed. The structural as well as photophysical and electronic properties were systematically examined.</p>
Notes	
Genre	Research Paper
URL	<a href="http://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=2017000001-20170158">http://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=2017000001-20170158</a>

研究代表者	所属	理工学部	職名	准教授	補助額	500（特B）千円
	氏名	羽曾部 卓	氏名（英語）	Taku Hasobe		
研究課題（日本語）						
高効率光エネルギー変換系構築を指向した両親媒性ペンタセン誘導体の合成						
研究課題（英訳）						
Synthesis of Amphipathic Pentacenes for Solar Energy Conversion						
1. 研究成果実績の概要						
<p>ペンタセンはベンゼン環が五つ直線状に縮環した平面構造を持つ化合物であり、可視領域に幅広い吸収能と高いキャリア移動度を持つ代表的な有機半導体材料である。また、近年では、会合状態で一重項分裂(SF)という最低励起一重項状態(S1)が中間状態を経て二つの三重項励起状態(T1)を生成する特異な光物理過程を発現することが多数報告されている。しかしながら、ペンタセンの合成変換は比較的困難であることから、上述の物性の評価は固体もしくは溶液中における報告に限られている。そこで、本研究では親水および疎水相互作用を利用した中空を有するナノチューブ構造の構築をめざし、ペンタセンの 6,13 位にそれぞれ疎水基と親水基を導入した両親媒性ペンタセン誘導体を合成した。また、関連するペンタセン誘導体や参照化合物も合成し、超分子集合体の作製と一重項分裂や電子/エネルギー移動などの光物性評価を行った。</p> <p>両親媒性ペンタセン誘導体(計5種類)の合成はペンタキノンを出発原料として、菌頭カップリングを用いて疎水基(アルキル)と親水基(エチレングリコール)をそれぞれ逐次導入した後、塩化スズで酸化縮環することで達成した。親水基もしくは疎水基のみのペンタセンだけでなく、カルボキシル基やアルカンチオール鎖を有するペンタセンの合成も行い、有機-無機複合材料の展開も行った。親水性、疎水性および両親媒性のペンタセンはいずれも良好な分子集合体の構築が確認できた。特に、両親媒性のペンタセンではアスペクト比の極めて高いファイバー状の分子集合体の構築に成功した。一重項分裂やキャリア移動過程についてもそれぞれ確認でき、光および電子機能性分子集合体の構築に成功した。金属および半導体ナノ粒子に修飾したペンタセンについては一重項分裂のみならず電子/エネルギー移動などの光物理過程との共役についても成功した。</p>						
2. 研究成果実績の概要（英訳）						
<p>Pentacene is one of representative organic semiconductor materials, which have efficient light-harvesting in the visible region as well as carrier transport properties. In addition, singlet fission, where one singlet exciton converts into the two triplet excitons, efficiently occurs in the dimeric and crystal forms. Thus, control of the internal structures of pentacene aggregates enables us to demonstrate the peculiar photophysical properties. In this work, we have reported on the first synthesis of amphipathic pentacenes substituted by both hydrophilic and hydrophobic chains at 6 and 13 positions together with the related pentacene derivatives. In all pentacene derivatives, the characteristic supramolecular formations were observed. The structural as well as photophysical and electronic properties were systematically examined.</p>						
3. 本研究課題に関する発表						
発表者氏名 (著者・講演者)	発表課題名 (著書名・演題)	発表学術誌名 (著書発行所・講演学会)	学術誌発行年月 (著書発行年月・講演年月)			
Daiki Kato, Hayato Sakai, Yasuyuki Araki, Takehiko Wada, Nikolai V Tkachenko and Taku Hasobe	Concentration-dependent photophysical switching in mixed self-assembled monolayers of pentacene and perylene diimide on gold nanoclusters	Phys. Chem. Chem. Phys.	2018年2月			
Taku Hasobe, Hayato Sakai	High-Yield and Long-Lived Triplet Excited States of Pentacene Alkanethiolate Monolayer Protected Gold Nanoparticles By Singlet Fission	231st The Electrochemical Society Meeting	2017年5月			
吉野 圭祐、酒井 隼人、羽曾部 卓	親水性置換基を有するペンタセン誘導体の合成と分光特性	第28回基礎有機化学討論会	2017年9月			
吉野 圭祐、酒井 隼人、庄子良晃、梶谷 孝、福島 孝典、姉帯 勇人、芥川 智行、蒲江、竹延 大志、Nikolai Tkachenko、羽曾部 卓	長鎖置換基導入によるペンタセンの形態制御と光物性評価	日本化学会 第98春季年会	2018年3月			
稲谷 隆太郎、酒井 隼人、Nikolai Tkachenko、羽曾部 卓	ペンタセンダイマー修飾 CdSe/ZnS ナノ粒子におけるエネルギー移動と一重項分裂の逐次的反応進行	日本化学会 第98春季年会	2018年3月			