

# 新規芳香族多環系有機分子の過渡吸収スペクトル評価

<sup>a</sup>徳島大学, <sup>b</sup>産業技術総合研究所

中山 大樹<sup>a</sup>,古部 昭広<sup>a</sup>,松崎 弘幸<sup>b</sup>

## 目的

シングレットフィッショントリプルト（SF）は、有機分子固体において、励起一重項状態 ( $S_1$ ) の分子と隣接する基底状態 ( $S_0$ ) の分子が相互作用することによって2つの励起三重項状態 ( $T_1$ ) に遷移する過程である。励起子生成の量子効率が200%になることから、高効率有機薄膜太陽電池に応用することが期待されている。このSFには、 $E(S_1) \geq E(2T_1)$ というエネルギー差が必要となる。本研究で使用したペロピレンは、この差が非常に小さく高効率のSFが期待されている。本研究では、 $S_1$ のエネルギーを制御するためにPhenyl基、Butyl基を付与したペロピレン誘導体に対し、過渡吸収測定を行い、パルスレーザー照射で生成する励起子の緩和過程を明らかにすることでSFの反応機構を評価した。[1]

## 成果

355 nmのナノ秒励起光を用いてPhenyl peropyrene、Butyl peropyrene (大阪大学久保孝史研究室にて合成)の結晶粉末に対し、微細構造解析プラットフォームの装置を利用して、ナノ秒時間領域の過渡吸収測定を行った。各試料は粉末であるため拡散反射光学系を用いた。

Phenyl peropyrene結晶の過渡吸収測定の結果をFigure 1(a)に示す。比較実験として行ったPhenyl peropyrene溶液の過渡吸収測定の結果から $S_1$ の吸収帯が700~800 nm付近に、 $T_1$ の吸収帯が525 nm付近に見られることが明らかとなった。Figure 1(a)において同様の波長に注目すると、励起後10psの700 nm付近に $S_1$ の吸収帯が観察できた。しかし、 $T_1$ の吸収帯を観察できなかった。これより $S_1$ 状態からは、SFは起こらないことが分かった。

$S_1$ より高いエネルギー状態である $S_n$ からのSFを観察するために、励起光強度を高くし、励起子-励起子消滅が発生する状態で過渡吸収測定を行った。この実験では、徳島大学のフェムト秒過渡吸収分光装置を用いた。その結果をFigure 1(b)に示す。励起後1 nsに注目すると、700 nm付近の $S_1$ の吸収帯が減衰した後に570 nm付近に過渡吸収信号が残っているのがわかる。これは $S_n$ 状態からのSFで $T_1$ が生成したことによるものであると考えた。これらの結果から、 $S_1$ からのSFを実現させるには、ペロピレンの $S_1$ のエネルギー状態がより高くなるように分子設計をする必要があると分かった。

[1] K Uchida, T Kubo, D Yamanaka, A Furube, H Matsuzaki, R Nishii, Y. Sakagami, A. Abulikemu, K. Kamada, Canadian Journal of Chemistry, 2017, 95, 432-444

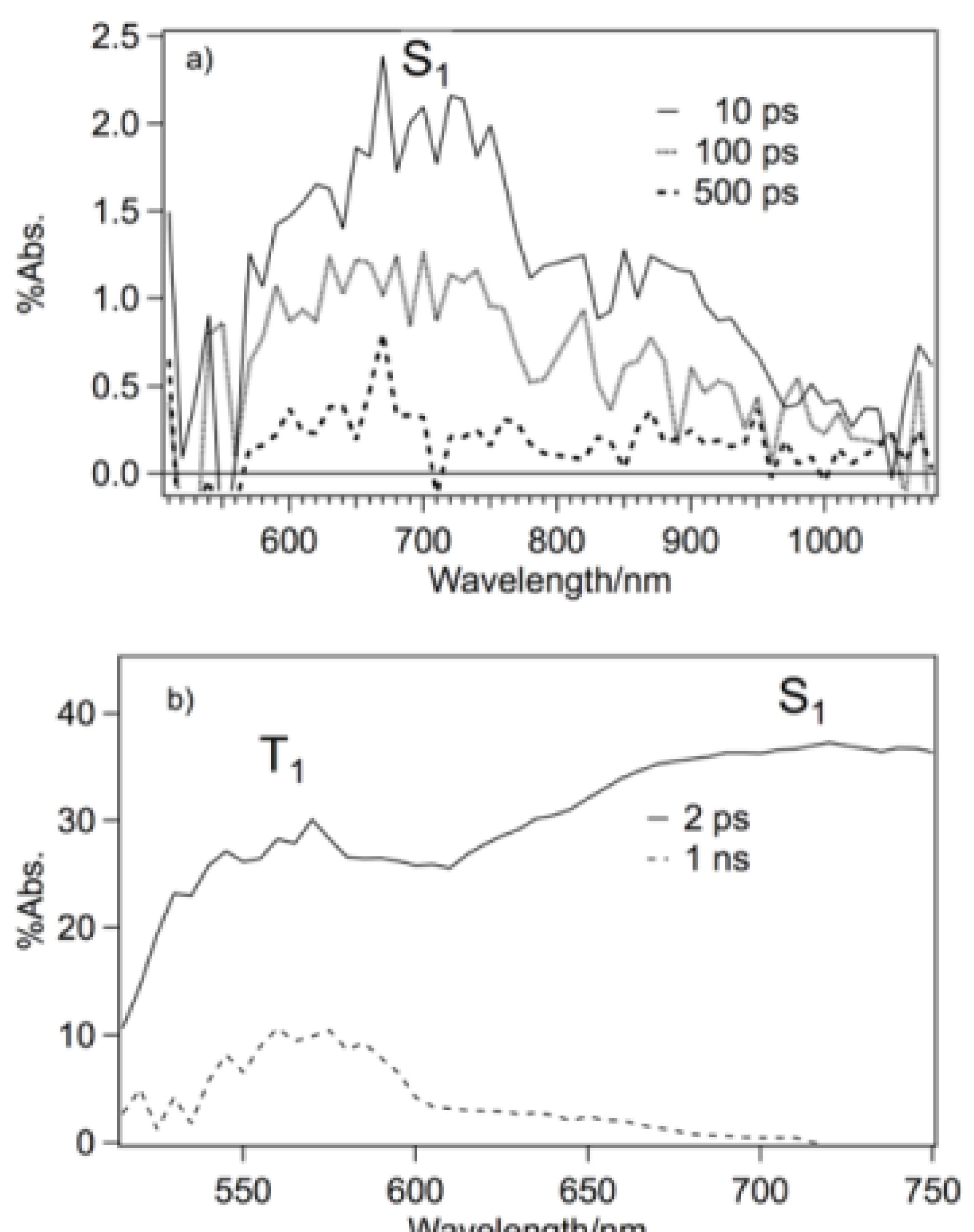


Figure 1:phenyl peropyrene結晶の過渡吸収スペクトル

## 実施機関からのコメント

申請者との綿密なやり取りの下、独自開発装置であり、様々な光学配置が可能であることを生かして、大型の単結晶が得られにくい試料に対して、粉末試料を対象に拡散反射光学系を適用して、広帯域かつ高感度に過渡吸収スペクトルを測定した。その結果を基に、有機分子固体ペロピレン誘導体におけるシングレットフィッショントリプルトの反応機構と分子設計指針を明らかにできた成果事例である。

(支援実施者：松崎 弘幸, 岡林 裕介)