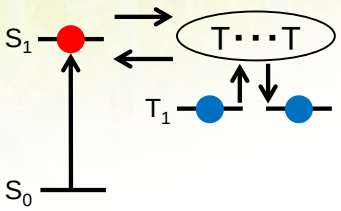
Research Center for Photovoltaics

ジフェニルヘキサトリエン誘導体の一重項励起子分裂：蛍光磁場効果

（日本大学工学部[1]・産業技術総合研究所[2]） ○福島 未彩[1]、佐藤 健太[1]、橋本 正明[1]、園田 与理子[2]（電子光技術研究部門 分子集積デバイスグループ）、関 和彦[2]（ナノ材料研究部門 ナノ薄膜デバイスグループ）、加藤 隆二[1]

研究の目的



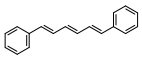
$S_1 \rightleftarrows [T\ldots T] \rightleftarrows T_1+T_1$

Singlet Fission (SF)

一つの光子から二つの励起子
＝二つの電子生成の可能性
→高効率太陽電池の可能性

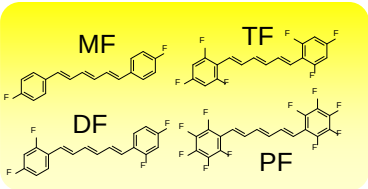
→新規化合物探索
→SF発現機構
→透明薄膜化

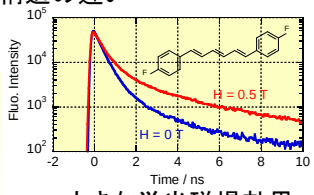
試料と構造



DPH

誘導体に注目
→電子状態・結晶構造の違い



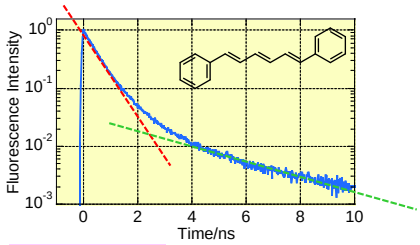


大きな蛍光磁場効果
→SF材料！

結果と考察（結晶での反応速度の温度依存性と結晶構造相関）

$S_1 \rightleftarrows [T\ldots T] \rightleftarrows T_1+T_1$

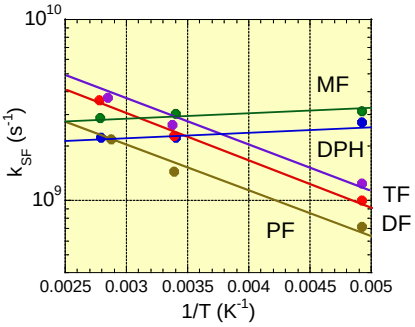
SF速度　TT対再結合



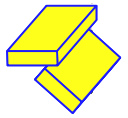
温度依存性と構造 [1]

対再結合ダイナミクスモデル [2]

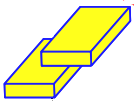
SF速度の温度依存性と結晶構造相関 [1]



蛍光の磁場効果＋蛍光減衰挙動[2]からSF材料と判定



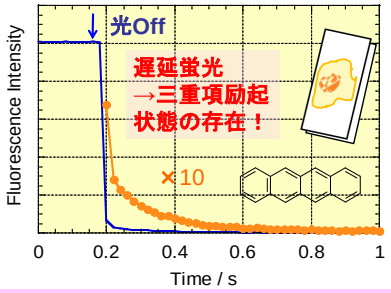
ヘリングボーン構造
温度依存無し



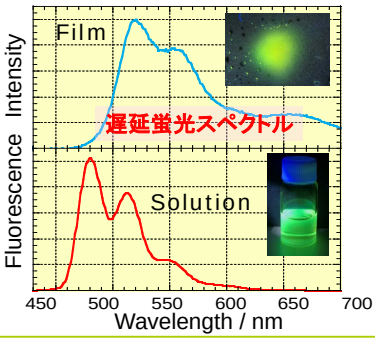
平行構造
熱活性型温度依存
活性化エネルギー
約600 cm^{-1}

分子の相対配置
→電子的カップリングの違いが重要

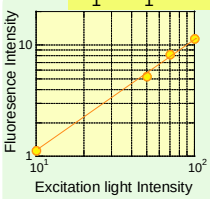
結果と考察（透明薄膜化の試み）



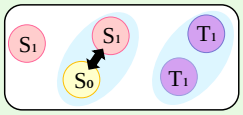
溶融ポリスチレンにテトラセンをドープ



$T_1 + T_1 \rightarrow S_1$ →遅延蛍光



遅延蛍光は励起光強度に比例
→1光子でT_1が2個が生成
→Singlet fission (SF)！



高密度にドープさせた透明薄膜でSFを実現

結論

Singlet Fission:

- ・新材料探索　フッ素置換DPHの発見
- ・SFメカニズム　SF速度と分子パッキングの相関 [1]
  再結合kineticsのモデル提案 [2]
- ・透明薄膜化　高濃度テトラセンドープ膜でSFを実現

→SF後に近赤外発光する透明薄膜の開発を目指す。

参考文献

[1] Singlet Fission in Fluorinated Diphenylhexatrienes
R. Katoh, M. Hashimoto, A. Takahashi, Y. Sonoda, T. Yago, M. Wakasa, J. Phys. Chem. C 121 (2017) 25666-25671.

[2] Diffusion-Mediated Delayed Fluorescence by Singlet Fission and Geminate Fusion of Correlated Triplets
K. Seki, Y. Sonoda, R. Katoh, J. Phys. Chem. C 122 (2018) 11659-11670.