

薄膜状態で長寿命励起状態をもつ非フラーレン型電子受容体分子の理論的研究

(京大工¹・京大院工²・京大 ESICB³・京大福井センター⁴・京大 iCeMS⁵) ○浦上 拓臣¹・佐藤 啓文^{2,3,4}・今堀 博^{2,5}・東 雅大^{2,3}

Theoretical study of a non-fullerene acceptor molecule with long excited-state lifetime in the film state (¹*Faculty of Engineering, Kyoto Univ.*, ²*Graduate School of Engineering, Kyoto Univ.*, ³*ESICB, Kyoto Univ.*, ⁴*Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto Univ.*, ⁵*iCeMS, Kyoto Univ.*) ○Takumi Urakami,¹ Hirofumi Sato,^{2,3,4} Hiroshi Imahori,^{2,5} Masahiro Higashi^{2,3}

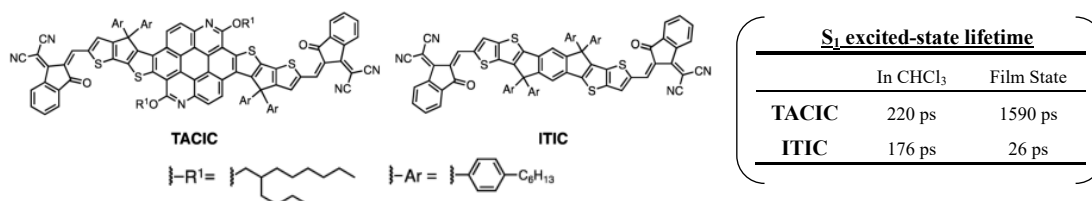
TACIC¹⁾ is an acceptor-donor-acceptor (A-D-A)-type non-fullerene acceptor (NFA), incorporating a thienoazacoronene, which exhibits self-assembly behavior, as the donor core. Although TACIC has a similar structure and bandgap to ITIC, a representative A-D-A type NFA, the TACIC film has a 50 times longer S₁ excited-state lifetime than the ITIC film. We analyzed TACIC and ITIC with theoretical methods to clarify this significant difference.

Quantum chemical calculations on the monomer suggest that the twisting of a double bond is involved in the relaxation of the excited state. We further performed quantum chemical calculations on several different stacked dimers and molecular dynamics (MD) simulations of the amorphous thin films, suggesting differences between TACIC and ITIC film structures. The relaxation process in the film state was also examined based on the calculated results.

Keywords : Organic Photovoltaics; Quantum Chemical Calculation; Molecular Dynamics Simulation; Excited States; Electron Acceptors

TACIC¹⁾ は、自己集合挙動を示すチエノアザコロネンをドナーコアとして組み込んだアクセプター-ドナー-アクセプター(A-D-A)型の非フラーレン型電子受容体(NFA)である。TACIC は代表的な A-D-A 型 NFA である ITIC と類似の構造やバンドギャップをもつにもかかわらず、TACIC 膜は ITIC 膜より 50 倍以上も長寿命の一重項励起状態を示す。この大きな寿命の違いの原因は解明されていない。そこで、本研究では TACIC と ITIC について理論計算により解析を行った。

単量体の量子化学計算の結果、アクセプター部位とドナー部位の間の二重結合がねじれて励起状態が緩和することが示唆された。さらに、異なるスタッキング構造の複数の二量体についても量子化学計算を行い、また薄膜を想定したアモルファス状態の MD シミュレーションを実行した。その結果、TACIC と ITIC の薄膜中の構造に違いがあることが示唆された。薄膜中の構造情報をもとに緩和過程の検討も行った。



1)Umeyama, T. et al. Chem. Sci. **2020**, 12, 39236.