

Slip-Stack 型および Herringbone 型配置のペンタセン一次元集合系モデルにおけるシングレットフィッシュンダイナミクス

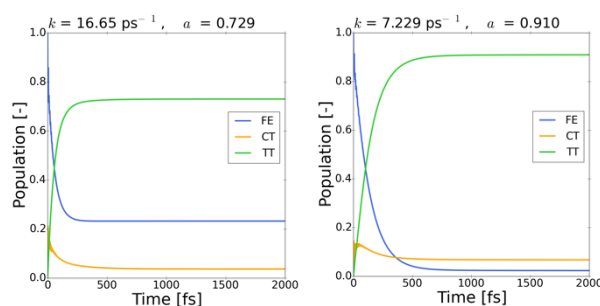
(阪大基礎工¹・阪大院基礎工²・阪大 QIQB³・阪大 CSRN⁴) ○徳山 和明¹・宮本 孟²・永海 貴識²・中野 雅由^{2,3,4}

Singlet Fission Dynamics of Pentacene Linear Aggregate Models in the Slip-Stack and Herringbone Configurations (¹*School of Engineering Science, Osaka University*, ²*Graduate School of Engineering Science, Osaka University* ³*Center for Quantum Information and Quantum Biology (QIQB), Osaka University*, ⁴*Center for Spintronics Research Network (CSRN), Osaka University*) ○Kazuaki Tokuyama,¹ Hajime Miyamoto,² Takanori Nagami,² Masayoshi Nakano^{2,3,4}

Singlet fission (SF) – a photophysical process, where a singlet exciton splits into two triplet excitons – has attracted much attention due to its potential to improve conversion efficiency in organic solar cells. A typical SF molecule, pentacene, has a herringbone configuration in the crystal, while the slip-stack configuration is predicted to be more efficient for SF, based on the study of SF effective coupling in the dimer model. In this study, we construct pentacene linear aggregate models in the slip-stack and herringbone configurations and investigate the SF dynamics using the quantum master equation method. It is found that the SF rate is larger in the slip-stack configuration than in the herringbone configuration, while the triplet exciton yield is lower in the slip-stack configuration than in the herringbone configuration.

Keywords: Singlet fission; Quantum dynamics; Quantum master equation; Pentacene; Quantum chemical calculation

シングレットフィッシュン(SF)は、1つの一重項励起子が2つの三重項励起子に分裂する光化学過程であり、有機太陽電池の光電変換効率向上への期待から近年盛んに研究されている¹⁾。典型的なSF分子であるペンタセンは結晶中でherringbone型の配置をとるが、2量体におけるSF有効カップリングの研究からslip-stack型配置がより高効率のSFを起こすことが予測されている²⁾。本研究では、slip-stack型、herringbone型に配置したペンタセン一次元集合系モデルを構築し、量子マスター方程式法によるSFダイナミクスを実行した。その結果、4量体モデルでは、図1に示すように、slip-stack型では、herringbone型よりもSFレート k は2.3倍増大するが、相関三重項対励起子の収率 a は~20%低下することが判明した。



1) S. Ito, T. Nagami, M. Nakano, *J. Photochem. Photobiol. C* **2018**, 34, 85.

2) A. Zaykov et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, 141, 17720.

図1. ペンタセン4量体モデルのエキシトン状態(FE,CT,TT)のポピュレーションの時間発展。左:slip-stack型配置 右:herringbone型配置