

## MOF 中におけるシングレットフィッション

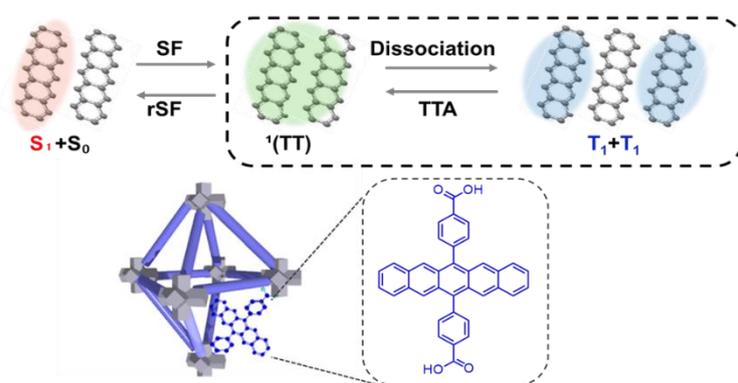
(九大院工<sup>1</sup>・九大院理<sup>2</sup>・九大 CMS<sup>3</sup>・JST さきがけ<sup>4</sup>) ○田中 健太郎<sup>1</sup>・藤原 才也<sup>1</sup>・佐々木 陽一<sup>1</sup>・宮田 潔志<sup>2</sup>・恩田 健<sup>2</sup>・楊井 伸浩<sup>1,4</sup>・君塚 信夫<sup>1,3</sup>

Singlet Fission in metal-organic-framework (<sup>1</sup>Graduate School of Engineering, Kyushu University, <sup>2</sup>Graduate School of Science, Kyushu University, <sup>3</sup>Center for Molecular Systems, Kyushu University, <sup>4</sup>Presto JST) ○Kentaro Tanaka,<sup>1</sup> Saiya Fujiwara,<sup>1</sup> Yoichi Sasaki,<sup>1</sup> Kiyoshi Miyata,<sup>2</sup> Ken Onda,<sup>2</sup> Nobuhiro Yanai,<sup>1,4</sup> Nobuo Kimizuka<sup>1,4</sup>

Singlet Fission (SF) is a process that a pair of triplet excitons residing on different chromophores is formed from one singlet exciton. It has attracted much attention for overcoming the Shockley-Queisser limit in single-junction solar cells. For the efficient formation of free triplets by SF, it is crucial to control the molecular orientation and electronic coupling between the interacting chromophores. In this study, we synthesized MOFs by combining metal ions with pentacene-based ligands to control the molecular orientation and thermal dynamics of the pentacene chromophores.

**Keywords :** Singlet Fission; Triplet excited state; Metal-organic-framework

シングレット・フィッション (SF) は、光吸収により生じた 1 つの一重項励起子が隣接する分子と電気的に相互作用することにより 2 つの三重項励起子に分裂する過程であり (Figure 1)、太陽電池のエネルギー変換効率を飛躍的に向上させる戦略の一つとして近年注目を集めている。SF により分子間に電気的な相関を持つ相関三重項対が生成され、相関三重項対から 2 つの独立した三重項励起子が生成される。相関三重項対から効率よく三重項励起子を生成するためには、三重項対の分子間に生じる電子的な相互作用を制御することが重要である。そこで本研究では、高い結晶性を持ち、色素間の距離や配向を精密に設計可能な多孔性金属錯体 (metal-organic frameworks; MOFs) に着目した。SF を示す代表的な分子であるペンタセンを骨格に持つ配位子を用いて MOF を合成し (Figure 1)、高速分光を用いた SF 特性の評価を行った。



**Figure1 (a) Schematic illustration of SF**  
**(b) MOF composed of pentacene-containing ligands**