

## ペンタセンマルチリング分子集合系モデルにおけるシングレットフィッションダイナミクスに関する理論研究

(阪大院基礎工<sup>1</sup>・阪大 QIQB<sup>2</sup>・阪大 RCSEC<sup>3</sup>・阪大 CSRN<sup>4</sup>・阪大 ICS-OTRI<sup>5</sup>) ○宮本 孟<sup>1</sup>・岡田 健治<sup>1</sup>・徳山 和明<sup>1</sup>・岸亮平<sup>1,2,3</sup>・北河康隆<sup>1,2,3,4</sup>・中野雅由<sup>1,2,3,4,5</sup>

Theoretical Study on Singlet Fission Dynamics in Pentacene Multi-ring aggregate Models (<sup>1</sup>Graduate School of Engineering Science, Osaka University, <sup>2</sup>Center for Quantum Information and Quantum Biology, Osaka University, <sup>3</sup>Research Center for Solar Energy Chemistry, Osaka University, <sup>4</sup>Center for Spintronics Research Network, Osaka University, <sup>5</sup>Innovative Catalysis Science Division, Institute for Open and Transdisciplinary Research Initiatives, Osaka University) ○Hajime Miyamoto,<sup>1</sup> Kenji Okada,<sup>1</sup> Kazuaki Tokuyama,<sup>1</sup> Ryohei Kishi,<sup>1,2,3</sup> Yasutaka Kitagawa,<sup>1,2,3,4</sup> Masayoshi Nakano<sup>1,2,3,4,5</sup>

Singlet Fission (SF) is a photophysical process in which one singlet exciton  $S_1$  splits into two triplet excitons in organic molecular aggregates. SF is expected to improve the photoelectric conversion efficiency in organic solar cells. In this study, we have investigated the SF dynamics in pentacene multi-ring aggregate systems shown in Figure 1 by using quantum master equation approach. We focused on the aggregate configuration dependences (represented by inter-ring and intra-ring relative configuration) of site selectivity of correlated-double triplets pair (TT) generated by SF process.

**Keywords :** Singlet Fission; Quantum Master Equation; Ring-Shaped Molecular Aggregate; Exciton Dynamics; Pentacene

シングレットフィッション (SF) は、光励起によって生じた一重項励起子  $S_1$  が、隣接分子間の  $\pi$  軌道重なりによる相互作用により二つの三重項励起子に分裂する現象であり、有機太陽電池の光電変換効率向上への応用の観点から盛んに研究が行われている<sup>1</sup>。SF は二分子以上で起こる現象であるため、効率的な SF 材料の設計には単分子レベルから分子集合系レベルでの構造-SF 特性相関に関する知見の蓄積が不可欠である。本研究では、分子集合系のトポロジーが SF 特性に与える影響を明らかにするために、図 1 のような分子間隔の異なる二種類の J 型環状 3 量体<sup>2</sup>を並列したマルチリング集合系モデルにおける SF ダイナミクスを量子マスター方程式法に基づき計算した。本モデルでは主に、Ring2 内およびリング間の分子間距離  $d_1$ ,  $d_2$  [Å] をパラメータとして、TT 生成の位置選択性の制御について議論した。

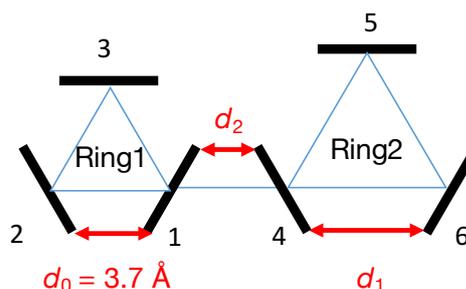


図 1. ペンタセン J 型環状 3 量体を並列したマルチリング集合系モデル

- 1) (a) M. B. Smith, J. Michl, *Chem. Rev.* **2010**, *110*, 6891. (b) S. Ito, T. Nagami, M. Nakano, *J. Photochem. Photobiol. C: Photochem. Rev.* **2018**, *34*, 85. (c) M. Nakano et al. *J. Comput. Chem.* **2019**, *40*, 89. 2) H. Miyamoto, M. Nakano, *ChemPhotoChem* **2020**, *4*, 5249.