

令和 6 年 6 月 24 日現在

機関番号：14301

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2022～2023

課題番号：22K19062

研究課題名（和文）縮環系 共役分子における無輻射遷移速度のエネルギーギャップ則の限界打破

研究課題名（英文）Nonradiative Transition Beyond Energy-Gap Law in Fused-Ring pi-Conjugated Molecules

研究代表者

大北 英生（Ohkita, Hideo）

京都大学・工学研究科・教授

研究者番号：50301239

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 5,000,000円

研究成果の概要（和文）：種々の縮環系 共役分子について、発光性の遷移過程である輻射遷移と非発光性の失活過程である無輻射遷移を系統的に検討した。その結果、輻射遷移速度は従来のモデル式によりおおむね評価できるものの、無輻射遷移速度については従来モデルのエネルギーギャップ則は単純には示さず、再配向エネルギーや分子軌道の広がりや凝集状態などの他の要因が支配的となることを明らかにした。これらの支配要因を適切に制御することにより無輻射遷移速度を抑制した分子設計が可能であることを示唆している。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究成果は、縮環系 共役分子の発光特性を利用した有機オプトエレクトロニクスにおける分子設計指針を与えるものである。特に、発光量子収率が一般に低く性能を十分に発揮することができていないエネルギーギャップの小さな近赤外域の縮環系 共役分子に対して、再配向エネルギーや分子軌道の広がりや凝集状態などを制御することによって、無輻射遷移速度を抑制するとともに発光量子収率を向上することができると期待される。

研究成果の概要（英文）：We systematically studied the radiative transition, which is a luminescent process, and the nonradiative transition, which is a nonluminescent process, for various fused-ring -conjugated molecules. As a result, we found that while the radiative transition rate can be roughly evaluated by the conventional model equation, the energy-gap law of the conventional model does not simply describe the nonradiative transition rate of these fused-ring -conjugated molecules, suggesting that the nonradiative transition would be limited by other factors such as reorganization energy, orbital spatial distribution, and aggregation state dominate rather than bandgap energy. The results suggest that it is possible to design molecules with suppressed nonradiative transition by appropriately controlling these limiting factors.

研究分野：高分子光物理・光化学

キーワード：縮環系共役分子 輻射遷移 無輻射遷移 エネルギーギャップ則 再配向エネルギー 振電相互作用  
分子軌道 凝集状態

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

### 1. 研究開始当初の背景

研究代表者は、これまでに共役高分子を用いた有機薄膜太陽電池に生成した励起子および電荷キャリアのダイナミクスを過渡吸収分光法によって世界に先駆けて明らかにしてきた。特に、励起子ダイナミクスについては、高分子太陽電池の効率向上の鍵となってきた基幹材料である結晶性共役高分子、狭バンドギャップ共役高分子、縮環系  $\pi$  共役分子に焦点をあてて研究を展開してきた。

共役高分子を用いた高分子太陽電池では、さらなる長波長光の捕集を目指して近赤外域にまで吸収帯を有する狭バンドギャップ共役高分子が多数開発されてきた。しかし、長波長化により光捕集波長域を拡大するとむしろ変換効率が低下するという課題に直面していた。その一方で、図 1a に示すような縮環構造の  $\pi$  共役系が発達したアクセプター分子を用いた太陽電池では長波長化により効率が向上し、現在では 19% を超えるまでに至っている。

この決定的な違いの原因を明らかにするため共役高分子ならびにアクセプターである縮環系  $\pi$  共役分子の励起子ダイナミクスに関する比較検討を系統的に行った。その結果、図 1b に示すように、縮環系  $\pi$  共役分子の無輻射遷移速度のエネルギーギャップ依存性は、共役高分子のエネルギーギャップ依存性よりも緩やかであり、系によっては図中黒丸で示すように、無輻射遷移速度が大幅に抑制されるという興味深い現象を見出した。そこで、縮環系  $\pi$  共役分子における無輻射遷移速度を包括的に探究する本研究課題の立案に至った。

### 2. 研究の目的

本研究の目的は、縮環系  $\pi$  共役分子の無輻射遷移速度に対するエネルギーギャップ則とそれを打ち破るための学理を探究することである。これまでに、バンドギャップエネルギー  $E_g$  の異なる種々の共役高分子の無輻射遷移速度  $k_{nr}$  ( $\Delta$ ) が、図 1b の破線に示すように、 $E_g$  の低下とともに指数関数的に増加するいわゆるエネルギーギャップ則を示すことを明らかにした。この発見により、 $E_g$  の小さな狭バンドギャップ共役高分子を用いた太陽電池の変換効率が低い値にとどまっている原因が、速い無輻射遷移速度  $k_{nr}$  により励起子が電荷へ解離する前に失活していることを明らかにした。図 1a に示すような縮環系が発達した  $\pi$  共役分子に対して同様の測定を行ったところ、(○) に示すように共役高分子よりもやや緩やかなエネルギーギャップ則を示す傾向が見られた。しかし、さらに測定を行ったところ、これらの傾向から大きく外れる分子 (●) をいくつか見出した。この結果は、エネルギーギャップ則が破綻していることを示している。これらの実験事実、縮環系  $\pi$  共役分子では、 $E_g$  が小さい分子でも無輻射遷移速度  $k_{nr}$  の増加は共役高分子に比べると限定的であり、分子によっては無輻射遷移速度  $k_{nr}$  を大幅に抑制することが可能であることを示している。そこで本研究では、縮環系  $\pi$  共役分子における緩やかなエネルギーギャップ則の起源を解明することを第一の目的とし、エネルギーギャップ則が破綻し大幅に無輻射遷移速度  $k_{nr}$  が抑制される系に共通する因子 (機構) を明らかにすることを第二の目的とする。つまり、縮環系  $\pi$  共役分子におけるエネルギーギャップ則を理解するとともにそれを打ち破るための学理を探究することを目指す。

### 3. 研究の方法

無輻射遷移速度は分子振動へのエネルギー散逸過程であるので、無輻射遷移を支配する振動について分子内および分子間の寄与を明らかにするため、それぞれ溶液系および薄膜凝集系について検討する。これまでの予備的検討から溶液系においても縮環系  $\pi$  共役分子のエネルギーギャップ依存性はカロテンなどの線形共役分子よりも緩やかであることを明らかにしている。溶液中における孤立分子系での無輻射遷移速度  $k_{nr}$  については単一振動モード近似式を用いて解析し、再配向エネルギー  $\lambda$ 、主たる振動モード  $\hbar\omega$  ならびに振電相互作用  $C$  の観点から検討する。量子化学計算により具体的な分子振動モードや軌道の広がり計算し、無輻射遷移速度  $k_{nr}$  の違いと分子構造の関係を議論する。一方、薄膜凝集状態では励起状態が  $N$  ユニットに非局在化すると、再配向エネルギー  $\lambda$  は  $1/N$  倍に減少し、実効的な再配向エネルギー  $\lambda_{eff}$  は  $\lambda/N$  となる。これにより無輻射遷移速度  $k_{nr}$  の抑制を定性的に説明できるので、分子の凝集構造と無輻射遷移速度  $k_{nr}$  の関係についても検討する。

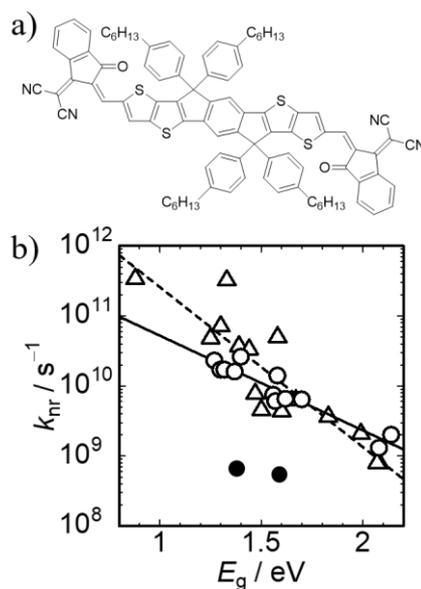


図 1. a) 代表的な縮環系  $\pi$  共役分子 ITIC の分子構造。b) 無輻射遷移速度  $k_{nr}$  とバンドギャップエネルギー  $E_g$  の関係: 共役高分子薄膜 ( $\Delta$ )、縮環系  $\pi$  共役分子薄膜 (○)。

#### 4. 研究成果

##### 【縮環系 $\pi$ 共役分子における長寿命励起子】

図 2 に示す縮環系  $\pi$  共役骨格のジチエノナフトビスチアジアゾールをコアユニットに有する縮環系  $\pi$  共役分子 (YS3) について溶液系および薄膜系における各種励起子物性を検討したところ、薄膜中において著しく励起子寿命が長寿命化するという興味深い現象を見出したので、その起源について検討した。

図 3 に YS3 の吸収および発光スペクトルを示す。溶液試料に対しては、吸収では 600 nm 付近、発光では 735 nm 付近にいずれもブロードなスペクトルが観測された。一方、薄膜試料に対しては、吸収では 740 nm および 680 nm 付近に、発光では 810 nm および 895 nm 付近にそれぞれ 0-0 遷移および 0-1 遷移に由来する振動バンドが観測された。溶液状態に比べて薄膜状態において吸収ピーク波長が長波長シフトしていることから有効共役長が増大していることが示唆される。薄膜状態では YS3 の末端インダノン基のカルボニル基と隣接チオフェニル基の硫黄との相互作用により共役平面構造が誘起され有効共役長が増大したと考えられる。また、吸収スペクトルでは 0-0 遷移強度のほうが 0-1 遷移よりもはるかに強く J 凝集的な性質を示し、発光スペクトルでは 0-1 遷移強度の方が 0-0 遷移よりもはるかに強く H 凝集的な性質を示した。以上のことから、YS3 は薄膜状態では J 凝集と H 凝集の両方が存在し、発光はより安定な H 凝集状態からの発光遷移に起因すると考えられる。この結果は、以下で示すように、輻射遷移速度が溶液状態にくらべて薄膜状態において二桁程度抑制されていることとも符合する。

次に、YS3 の溶液状態と薄膜状態について蛍光寿命を測定したところ、図 4 に示すように、溶液状態では 0.14 ns に対して薄膜状態では 1.76 ns と 10 倍以上長寿命であることが分かった。蛍光寿命ならびに蛍光量子収率から輻射遷移速度を算出すると輻射遷移速度は溶液状態では  $3.2 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$  であり、これに対して薄膜状態では  $6.8 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$  と二桁程度抑制されていることから、薄膜状態では禁制遷移である H 凝集体からの発光により長寿命化していることを示唆している。一方、無輻射遷移速度については、溶液状態では  $6.8 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 、薄膜状態では  $5.6 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$  となり、一桁程度抑制されていることがわかった。

薄膜状態において無輻射遷移速度が抑制される原因について検討するため YS3 のニート膜の GIWAX 測定を行った。図 5 に示すように、YS3 のニート膜に対する二次元 GIWAX 像には明瞭な回折ピークが観測され、 $\pi$  スタック距離  $d_{\pi-\pi}$  は 3.69 Å、コヒーレンス長は 43.4 Å、ラメラ距離は 20.6 Å と見積もられた。ラメラ構造に起因する回折ピークが三次まで明瞭に観測されたことから結晶性が非常に高いことを示している。

以上をまとめると、溶液中においては末端インダノン基が自由回転するため無輻射遷移が促進され、励起子寿命が短くなると考えられる。このことはブロードな吸収および発光スペクトルからもうかがえる。一方、薄膜中では YS3 は良好な結晶構造をとることから末端基の自由回転等が制限され、無輻射遷移が抑制されることにより励起子寿命が長寿命化したと考えられる。このことは吸収および発光スペクトルに J 凝集構造ならびに H 凝集構造に由来する振動バンド観測が存在することと対応している。したがって、縮環系  $\pi$  共役分子は薄膜状態では凝集構造により分子運動が制限されることにより無輻射遷移が効果的に抑制されると考えられる。

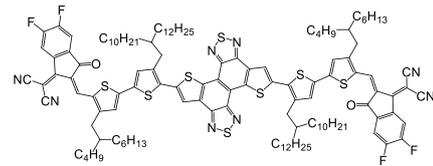


図 2. 縮環系  $\pi$  共役分子 YS3 の構造式。

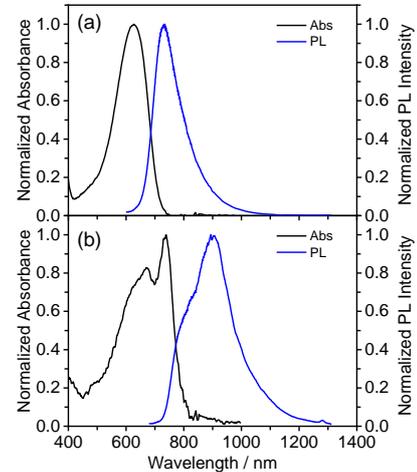


図 3. YS3 の吸収 (黒線) および発光 (青線) スペクトル: a) 溶液、b) 薄膜。

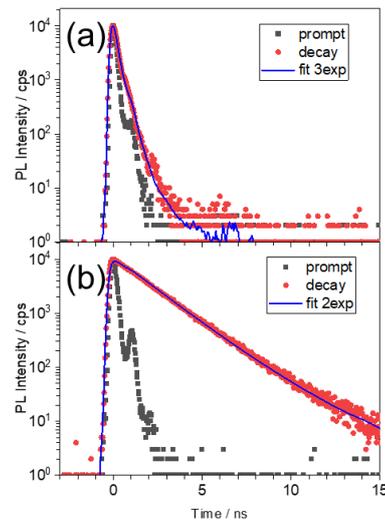


図 4. YS3 の PL 時間減衰: a) 溶液、b) 薄膜。

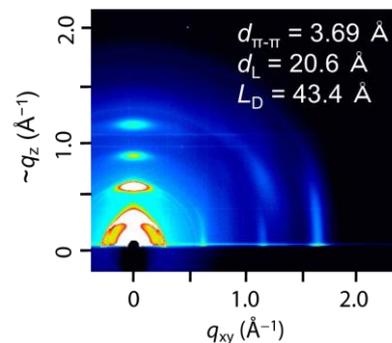


図 5. YS3 薄膜の 2D GIWAX 像。

【縮環系  $\pi$  共役高分子の輻射および無輻射遷移速度】

本研究では、 $\pi$  共役系の主鎖構造が異なる共役高分子における励起子物性に着目し、 $\pi$  共役構造と一重項励起状態における輻射遷移ならびに無輻射遷移の関係について比較検討を行った。具体的には、図 6 に示すように、縮環構造の異なる三種類の  $\pi$  共役系高分子について検討した。

まず、輻射遷移速度について実測値と理論式との対応を検討した。輻射遷移速度  $k_r$  は Strickler–Bergs 式に基づき、モル吸光係数ならびに蛍光スペクトルを用いて見積もることができる。例として、PTNT2T 薄膜の吸収および蛍光スペクトルを示す。図 7 に示すように、蛍光スペクトルは 754 nm 付近にピークを示す単峰でシャープな形状をしているのに対して、吸収スペクトルは 682 nm と 613 nm にピークを示す二峰でブロードな形状をしており、鏡像関係にないことが分かる。溶液状態での吸収スペクトルは高温ほど短波長側に大きくシフトすることから薄膜状態では凝集によりスペクトルが変化していると考えられる。吸収スペクトルにおける二つのピークは J 凝集ならびに H 凝集に由来すると考えられる。短波長側の吸収ピークに対応する H 凝集状態からの発光は禁制遷移であるので、観測された発光は長波長側の吸収ピークに対応する J 凝集状態からの発光に起因すると帰属した。したがって、観測した蛍光に起因する J 凝集の吸収スペクトルは蛍光スペクトルと鏡像関係にあると仮定し、図 7 の灰色部のような形状であるとした。この仮定のもと Strickler–Bergs 式を用いて輻射遷移速度  $k_r$  を評価したところ  $k_r = 3.7 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$  と見積もられ、実測値の  $k_r = 3.6 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$  と良い一致を示すことが分かった。その他の共役高分子についても同様に吸収スペクトルと蛍光スペクトルから輻射遷移速度  $k_r$  を評価したところ、PTQ1 では  $k_r = 7.9 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ 、PNTz4T では  $k_r = 6.8 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$  と見積もられ、実測値といずれも良い一致を示した。したがって、輻射遷移に関しては基本的にモル吸光係数により説明できることがわかった。

次に、無輻射遷移速度について実測値と理論式との対応について検討する。芳香族分子の無輻射遷移速度  $k_{nr}$  は Englman と Jortner により定式化され、 $\lambda < \hbar\omega$  の弱カップリングの条件では、単一の振動モード  $\hbar\omega$  に対して以下のように表される。

$$k_{nr} = \frac{C^2}{\hbar} \sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\omega E_g}} \exp\left(-\gamma \frac{E_g}{\hbar\omega}\right) \quad (1)$$

ここで、 $C^2$  は相互作用パラメータ、 $\lambda$  は再配向エネルギーであり、 $\gamma$  は定数とみなせる。式 1 から分かるように、 $E_g$  が同程度であれば、無輻射遷移速度  $k_{nr}$  は再配向エネルギー  $\lambda$ 、相互作用パラメータ  $C^2$ 、振動エネルギー  $\hbar\omega$  に依存する。このうち振動エネルギー  $\hbar\omega$  については、芳香族分子の場合は芳香環骨格の C=C 伸縮振動が主な振動モードであるので、今回用いた共役高分子についても骨格振動として  $\hbar\omega = 1500 \text{ cm}^{-1}$  (0.19 eV) を採用する。したがって、以降では再配向エネルギー  $\lambda$  と相互作用パラメータ  $C^2$  に着目してそれぞれ議論を進める。

再配向エネルギー  $\lambda$  は、吸収および発光スペクトルから評価した。基底状態  $S_0$  と最低一重項励起状態  $S_1$  間の遷移に関与する分子の振動を調和振動とみなし、 $S_0$  と  $S_1$  の放物線ポテンシャルの曲率が等しいと仮定すれば、吸収および発光にともなう再配向エネルギー  $\lambda$  は等しく、 $2\lambda = E_A - E_{PL}$  の関係にある。 $E_A - E_{PL}$  は吸収および蛍光スペクトルのピークエネルギーの差、すなわちストークスシフトから求めることができるので、各共役高分子についてストークスシフトから再配向エネルギーを評価すると、PTQ1 では  $\lambda = 0.12 \text{ eV}$ 、PNTz4T では  $\lambda = 0.10 \text{ eV}$ 、PTNT2T では  $\lambda = 0.08 \text{ eV}$  と見積もられた。つまり、主鎖の縮環構造が拡大するにつれて再配向エネルギーが低下していることを示している。剛直な縮環構造の拡張により基底状態と励起状態における平衡核配置の違いが減少したためとみることができる。また、今回用いた共役高分子の再配向エネルギーは 0.12 eV 以下であり、 $\lambda < \hbar\omega$  の弱カップリング条件を概ね満たしている。式 1 を用いて、無輻射遷移速度  $k_{nr}$  を再配向エネルギー  $\lambda$  に対してプロットすると、 $\lambda$  の減少とともに無輻射遷移速度  $k_{nr}$  も単調に減少することがわかる。この傾向は、再配向エネルギー  $\lambda$  が小さな共役高分子ほど無輻射遷移速度  $k_{nr}$  の値が小さいという実験事実と符合している。したがって、縮環構造が拡大した共役高分子では分子構造変化が抑制されることにより再配向エネルギーが低下し、無輻射遷移速度  $k_{nr}$  も効果的に抑制されていると考えることができる。

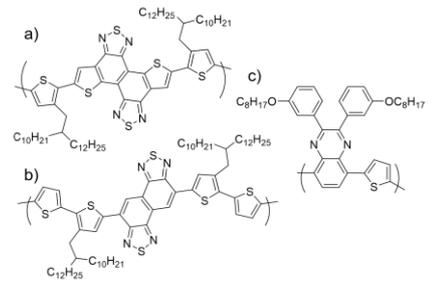


図 6. 縮環構造の異なる共役高分子の構造：a) PTNT2T, b) PNTz4T, c) PTQ1。

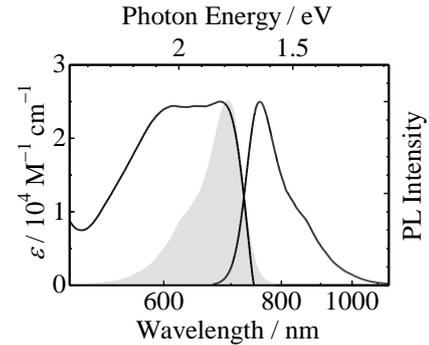


図 7. 縮環構造の異なる共役高分子の構造：a) PTNT2T, b) PNTz4T, c) PTQ1。

Cは振電相互作用と関連し、振電相互作用は無輻射遷移に関与する電子軌道の重なり密度と振動変位に関する項の積を空間積分したものに比例する。振動変位に関する項に関しては、今回用いた共役高分子では芳香環骨格のC=C伸縮振動に帰属できるので、いずれの系も主鎖縮環構造の二重結合に着目することとする。基底状態 $S_0$ と最低一重項励起状態 $S_1$ 間の遷移としてHOMOとLUMO間での遷移が主たる成分であると考えられるので、密度汎関数理論(DFT)計算によりHOMOおよびLUMOの軌道の広がり进行评估した。その結果を図8に示す。縮環構造が小さなPTQ1と縮環構造の大きなPTNT2Tを比較として取り上げる。HOMOについてはいずれの系ともに主鎖共役全体に広がっていることが分かる。一方、LUMOについては、PTQ1ではHOMOと同様に主鎖共役全体に広がっているのに対して、PTNT2TではTNTユニットに局在化するため主鎖の軌道密度は低下していることが分かる。したがって、PTQ1ではHOMOとLUMOの軌道の重なりが大きいのに対して、PTNT2Tでは軌道の重なりはかなり減少すると予想される。特

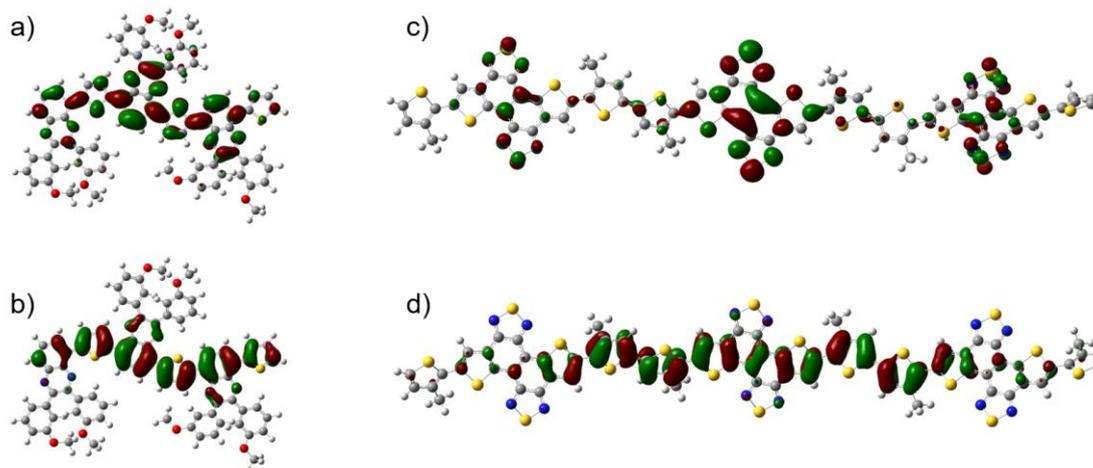


図8. DFT計算(B3LYP/6-311G(d,p))により求めた共役高分子三量体のフロンティア軌道：PTQ1のa) LUMO and b) HOMOとPTNT2Tのc) LUMO and d) HOMO。

に、PTNT2TのTNTユニットはHOMOとLUMOでは軌道の広がり特徴的な違いが見られる。HOMOはチアアジアゾール部位には広がらないのに対して、LUMOではチアアジアゾール部位にまで広がっているため、TNTユニットにおけるHOMOとLUMOの軌道の重なりが効果的に抑制されている。その結果、振電相互作用が低減し、無輻射遷移速度が抑制されたと考えられる。

#### 【研究成果のまとめ】

以上の研究成果により、縮環系 $\pi$ 共役分子の輻射遷移速度 $k_r$ ならびに無輻射遷移速度 $k_{nr}$ について系統的な知見を得ることができた。輻射遷移速度 $k_r$ については、モル吸光係数と発光スペクトルをもとに解析するStrickler-Bergs式を用いておおむね評価することができ、同程度の輻射遷移速度 $k_r$ を示すことがわかった。一方、無輻射遷移速度 $k_{nr}$ については、分子の凝集状態に強く依存し、高結晶状態では $k_{nr}$ が効果的に抑制され、長寿命励起子が生成することを明らかにした。また、 $E_g$ が同程度であり縮環構造の異なる共役高分子について系統的に無輻射遷移速度 $k_{nr}$ を検討したところ、再配向エネルギーが小さなものほど効果的に無輻射遷移速度 $k_{nr}$ が抑制されるとともに、主鎖 $\pi$ 共役系のHOMOとLUMOの軌道の重なりが小さな分子構造のものほど振電相互作用が低下し、無輻射遷移速度 $k_{nr}$ が抑制される傾向がうかがえた。この結果は、 $E_g$ 以外にも無輻射遷移速度 $k_{nr}$ に大きな影響を与える要因があることを示しており、単純なエネルギーギャップ則がこれらの系に見られない原因の一つである。以上のことから、単純なエネルギーギャップ則では大きな無輻射遷移速度 $k_{nr}$ をとると予想される $E_g$ の低い分子についても無輻射遷移速度 $k_{nr}$ を抑制した分子設計が可能であることを示唆している。

本研究成果は、縮環系 $\pi$ 共役分子の発光特性を利用した有機オプトエレクトロニクスにおける分子設計指針を与えるものである。特に、バンドギャップエネルギー $E_g$ の低い近赤外域の縮環系 $\pi$ 共役分子は発光収率が低く、その機能を十分には活用できていないのが課題の一つである。本研究成果をもとに、バンドギャップエネルギー $E_g$ 以外にも再配向エネルギーや凝集状態を制御することにより、バンドギャップエネルギー $E_g$ の低い近赤外域の縮環系 $\pi$ 共役分子においても無輻射遷移速度 $k_{nr}$ を抑制することにより発光量子収率を向上することができると期待される。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Sato Yuki, Mikie Tsubasa, Yamada Hiroya, Osaka Itaru, Ohkita Hideo	4. 巻 62
2. 論文標題 Exciton dynamics of a fused ring -conjugated nonfullerene molecule based on dithienonaphthobisthiadiazole	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SK1012 ~ SK1012
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/acc66b	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Jeon Jihun, Doi Kiyotaka, Kim Hyung Do, Ogawa Hiroki, Takenaka Mikihiro, Ohkita Hideo	4. 巻 55
2. 論文標題 Correlating the structures and photovoltaic properties in phase-separated blends of conjugated donor polymers and acceptors	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Polymer Journal	6. 最初と最後の頁 477 ~ 487
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41428-022-00718-9	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Saito Masahiko, Yamada Hiroya, Kranthiraja Kakaraparthi, Jeon Jihun, Kim Hyung Do, Mikie Tsubasa, Saeki Akinori, Ohkita Hideo, Osaka Itaru	4. 巻 4
2. 論文標題 Ordered -conjugated polymer backbone in amorphous blend for high efficiency nonfullerene organic photovoltaics	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Communications Materials	6. 最初と最後の頁 72
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s43246-023-00395-y	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Zaima Takeaki, Ota Wataru, Haruta Naoki, Uejima Motoyuki, Ohkita Hideo, Sato Tohru	4. 巻 14
2. 論文標題 Spontaneous-Symmetry-Breaking Charge Separation Induced by Pseudo-Jahn-Teller Distortion in Organic Photovoltaic Material	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 9706 ~ 9712
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.3c02527	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計27件（うち招待講演 11件 / うち国際学会 6件）

1. 発表者名 佐藤友揮, 三木江翼, 尾坂格, 大北英生
2. 発表標題 縮環系共役高分子における一重項励起子物性
3. 学会等名 第72回高分子学会年次大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Hideo Ohkita
2. 発表標題 Interface Engineering for Organic and Hybrid Solar Cells
3. 学会等名 15th International Conference on Hybrid and Organic Photovoltaics (HOPV23) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 佐藤友揮, 三木江翼, 齋藤慎彦, 尾坂格, 大北英生
2. 発表標題 高分子太陽電池に用いられる縮環 共役系分子の輻射・無輻射遷移速度
3. 学会等名 第20回「次世代の太陽光発電システム」シンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 山崎瑞祈, Hyung Do Kim, 大北英生
2. 発表標題 共役高分子薄膜におけるサブバンドギャップ吸収帯の分光解析
3. 学会等名 第69回高分子研究発表会(神戸)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Hideo Ohkita
2. 発表標題 New Horizons in Polymer Solar Cells
3. 学会等名 13th SPSJ International Polymer Conference (IPC 2023) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 佐藤友揮, 三木江翼, 尾坂格, 大北英生
2. 発表標題 縮環系 共役分子の輻射および無輻射遷移
3. 学会等名 2023年光化学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 佐藤友揮, 三木江翼, 尾坂格, 大北英生
2. 発表標題 縮環系共役高分子薄膜における一重項励起子寿命
3. 学会等名 第84回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 大北英生, Hyung Do Kim
2. 発表標題 高分子ブレンド薄膜に基づく有機光エレクトロニクス材料
3. 学会等名 第72回高分子討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Hideo Ohkita
2. 発表標題 Interface Engineering for Organic and Perovskite Photovoltaics
3. 学会等名 244th ECS Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 大北英生, 佐藤友揮
2. 発表標題 縮環系 共役分子の輻射および無輻射遷移速度
3. 学会等名 日本化学繊維研究所第81回講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 大北英生
2. 発表標題 有機薄膜太陽電池の素子特性評価・解析の基本
3. 学会等名 2023年有機エレクトロニクス講習会 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 佐藤友揮, 三木江翼, 尾坂格, 大北英生
2. 発表標題 縮環系 共役高分子薄膜の無輻射遷移
3. 学会等名 第5回フロンティア太陽電池セミナー
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 上月一輝, 三木江翼, 尾坂格, 大北英生
2. 発表標題 有機半導体ブレンド薄膜およびナノ粒子における電荷キャリア寿命
3. 学会等名 第5回フロンティア太陽電池セミナー
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 大北英生
2. 発表標題 高分子太陽電池の現状と課題
3. 学会等名 日本太陽光発電学会 次世代太陽電池セル・モジュール分科会 2023年度第2回研究会 (招待講演)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 大北英生
2. 発表標題 高分子およびペロブスカイト太陽電池における界面エンジニアリング
3. 学会等名 日本化学会 第104春季年会 (2024) CIP 光電変換デバイスの化学と物理 (招待講演)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 大北英生
2. 発表標題 高分子半導体を用いた次世代太陽電池の新展開
3. 学会等名 2023年度繊維学会東北・北海道支部講演会 (招待講演)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 大北英生
2. 発表標題 有機薄膜太陽電池の高効率化の最新状況と材料開発・今後の展望
3. 学会等名 AndTech 有機薄膜太陽電池材料WEB講習会（招待講演）
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 佐藤友揮, 田中拓海, 三木江翼, 斎藤慎彦, 尾坂格, 大北英生
2. 発表標題 縮環系 共役分子の無輻射遷移のエネルギーギャップ依存性
3. 学会等名 第71回高分子学会年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yuki Sato, Tsubasa Mikie, Hiroya Yamada, Itaru Osaka, Hideo Ohkita
2. 発表標題 Exciton Dynamics of Fused Ring Conjugated Molecule Based on Dithienonaphthobisthiadiazole
3. 学会等名 第39回国際フォトポリマーコンファレンス (ICPST-39) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大北英生, 玉井康成, キムヒョンド
2. 発表標題 高分子太陽電池のヘテロ接合界面に生成する電荷移動状態の制御による開放電圧の向上
3. 学会等名 第71回高分子討論会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 佐藤友揮, 石川巧, 駿河翔太, 三木江翼, 尾坂格, キムヒョンド, 大北英生
2. 発表標題 ジチエノナフトビスチアジアゾール骨格を有した縮環 共役分子の励起子物性
3. 学会等名 第71回高分子討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 佐藤友揮, 石川巧, 三木江翼, 尾坂格, キムヒョンド, 大北英生
2. 発表標題 ジチエノナフトビスチアジアゾール骨格をベースとした縮環 共役分子の無輻射遷移
3. 学会等名 2022年光化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大北英生
2. 発表標題 高分子太陽電池とペロブスカイト太陽電池の共通点と相違点 ~効率20%へのアプローチ~
3. 学会等名 JST MIRAI 令和4年度太陽エネルギー分野公開成果報告会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Tsubasa Mikie, Shota Suruga, Yuuki Sato, Takumi Ishikawa, Hyung Do Kim, Hideo Ohkita, Itaru Osaka
2. 発表標題 Novel $\pi$ -Conjugated Polymer Enabling Small Voltage Loss and High Charge Carrier Generation in Nonfullerene-Based Organic Photovoltaics
3. 学会等名 33rd International Photovoltaic Science and Engineering Conference (PVSEC-33) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yuki Sato, Hiroya Yamada, Tsubasa Mikie, Itaru Osaka, Hideo Ohkita
2. 発表標題 Exciton Dynamics of Fused Ring Conjugated Nonfullerene Acceptors Based on Dithienonaphthobisthiadiazole
3. 学会等名 33rd International Photovoltaic Science and Engineering Conference (PVSEC-33) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大北英生
2. 発表標題 効率20%に迫る高分子太陽電池の新展開
3. 学会等名 第21回高分子ナノテクノロジー研究会講座 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 大北英生
2. 発表標題 有機薄膜太陽電池の光電変換メカニズム
3. 学会等名 第70回応用物理学会春季学術講演会 (招待講演)
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	K I M H Y U N G D O  (Kim Hyung Do)  (80837899)	京都大学・工学研究科・助教    (14301)	

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	佐藤 友揮  (Yuki Sato)	京都大学・工学研究科・博士後期課程学生     (14301)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関