

令和 6 年 6 月 12 日現在

機関番号：14501

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2022～2023

課題番号：22K19008

研究課題名（和文）分子振動で短波長変換を実現する超高効率光アップコンバーター分子

研究課題名（英文）Photon up-conversion promoted by molecular vibration

研究代表者

小堀 康博（Kobori, Yasuhiro）

神戸大学・分子フォトサイエンス研究センター・教授

研究者番号：00282038

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,900,000円

研究成果の概要（和文）：近赤外光を高効率に可視光へ変換可能な有機薄膜固体内部における電子スピンのミクロな運動を調べ、中間体として生成する三重項励起子が固体内部の回転拡散運動でスピン状態を変化させて短波長の光を高効率に生じる様子を捉えることに世界で初めて成功した。また、TTA反応途中に形成される三重項励起子がペア(TT)となった状態三重項励起子の運動についてモデル解析した結果、スピン多重度変換が起きたことで、発光性の一重項励起子を77%におよぶ効率で生じさせていることが判明し三重項励起子の配向運動によるスピン双極子間相互作用の変調が、TTA反応効率に重要な役割を果たすことが明らかとなった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

中間体として生成する三重項励起子が固体内部の回転拡散運動でスピン状態を変化させて短波長の光を高効率に生じる様子を捉えることに世界で初めて成功した。これにより、今後、高効率光エネルギー変換デバイス開発が進展し、世界的なエネルギー問題解決に貢献するとともに、人体に害のない近赤外光を光アップコンバージョンさせ利用する光線力学的ながん治療や診断など幅広い分野への展開が期待される。

研究成果の概要（英文）：The microscopic motion of electron spins inside an organic thin-film solid capable of efficiently converting near-infrared light into visible light was investigated, and the authors succeeded for the first time in the world in capturing the highly efficient generation of short-wavelength light by the spin state change of triplet excitons formed as intermediates through rotational diffusion motion inside the solid. The model analysis of the motion of triplet exciton pairs (TT) formed during the TTA reaction revealed that the singlet exciton with luminescent properties is generated with an efficiency of 77% due to the spin multiplicity conversion, indicating that the modulation of the spin-dipole interaction by the orientation motion of the triplet exciton is responsible for the generation of short wavelength light. The modulation of the spin-dipole interaction due to the orientational motion of the triplet exciton plays an important role in the efficiency of the TTA reaction.

研究分野：光スピン化学

キーワード：三重項 - 三重項消滅 時間分解電子スピン共鳴法 スピン変換 蛍光量子収量 強相関多重励起子 スピン双極子相互作用 交換相互作用 アップコンバージョン

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

太陽光発電や光触媒ならびに、有機発光素子に限らず、医薬品開発や、光線力学的治療などの広範な分野で、TTA-UC による短波長変換に大きな期待が寄せられている。

有機薄膜太陽電池や、水を分解し水素をエネルギー源として取り出す光触媒の開発においては、太陽から豊富に注がれている近赤外光の有効活用として TTA-UC の利用に大きな期待が集まっている。有機光触媒分野においては、紫外領域の高い励起状態からの酸化・還元作用を利用する有機合成触媒として福住触媒に代表される材料開発が進んできたため、TTA-UC を利用することによる医薬品開発などにも大きな期待が寄せられる。光線力学治療においては、近赤外や赤外領域の電磁波が体内深部にまで浸透する性質を持つことから、TTA-UC など光を用いる活性酸素生成の超高効率化は、多臓器腫瘍に代表される難病治療に極めて有効なゲームチェンジャーになる。

小堀は基盤 A、学術変革領域 A などの研究助成を受け、時間分解電子スピン共鳴法をベースに世界最高性能の空間分解能を持つ中間体構造解析の画期的ツールとして独自に開発した「電子スピン分極イメージング法」を駆使し、時々刻々変化する多重励起子や光電荷分離状態の立体配置とその分子運動効果をナノ秒領域の三次元映像として求め、中間体精密立体構造と分子運動性の詳細を明らかにしてきた。なかでも非晶性固体での分子内一重項励起子分裂(SF)で生成する中間体多重励起子( $T_1T_1$ )のスピン状態と立体構造変化の詳細より、1)連結ダイマーの低振動モードとテラヘルツ領域のスピン交換相互作用の揺らぎによる共鳴効果で一重項-五重項変換が起こること、2)特定の振動が引き金となる構造変化によって  $T_1+T_1$  解離が起こることを明らかにし、柔軟な分子運動が収率 196% に及ぶ励起子生成収量に効果を発揮することを示した。これらにより、TTA-UC でも多重励起子による熱活性化で、効果的なスピン変換とそれに後続する短波長変換を実現できる。

## 2. 研究の目的

太陽光発電や光触媒ならびに、有機発光素子の開発では近年、クリーンな有機材料を用いた超高効率光エネルギー変換系へのデバイス応用に急速な期待が高まっている。本計画では三重項-三重項消滅(TTA)による光アップコンバージョン(短波長変換:UC)の超高効率化を、連結系一分子レベルの分子振動が誘起する五重項-一重項スピントリプルによって合理的に達成させる。このための基礎研究として主に時間分解電子スピン共鳴(TREPR)法を用い、三重項励起子の出会いにより生成する分子内多重励起子( $T_1T_1$ )のスピン変換過程による一重項励起子生成機構の詳細を明らかにする。熱活性化された特定の分子振動モードによる五重項多重励起子から一重項への超高効率変換機構を、TREPR 法によるマイクロ波の吸収(A)や放出(E)信号の観測とそれら信号に対する量子論を用いた電子スピン分極モデルによる解析により世界で初めて実証する。

## 3. 研究の方法

現有する X および Q バンドレーザー励起時間分解電子スピン共鳴(TREPR)計測システムを用いる。連結分子によるアップコンバータ材料について、薄膜作製を行う。近赤外、

赤色 LED 照射で生成する連結アップコンバータからの蛍光を定常分光測定、時間分解蛍光測定法によって観測し蛍光量子収量およびその励起光強度依存性を測定する。超高効率化の機構解明のために、TREPR 測定を用いる。強相関多重励起子<sup>5</sup>(TT)や解離状態( $T_1+T_1$ )によるマイクロ波の吸収(A)、放出(E)を示す電子スピン分極を TREPR スペクトルとして取得する。1)三重項光増感で生成する出会い多重励起子すなわち、2) $T_1+T_1$ と、3)熱活性化による構造変化で自発的に生成する強相関多重励起子( $T_1T_1$ )構造、4)一重項多重励起子変換、5)強相関一重項励起子による自発的な三重項-三重項消滅のすべてを特徴づける。このため、小堀が独自に構築し確立した量子論による電子スピン分極モデルを多重励起子系に適応し解析に用いる。スピンハミルトニアンとして励起子スピン双極子相互作用、励起子-励起子間スピン双極子相互作用、交換相互作用( $J$ )によるスピン相関を考慮した多重励起子スピン関数の対角化を行う。電子スピン分極移動モデルのなかに、分子内振動による配向運動効果を導入する。量子論に従い9つのスピン波動関数に対し、強相関五重項および解離多重励起子への量子もつれの射影化を行う。得られる EPR 遷移を各磁場方向に対して積分処理して多重励起子の精密立体構造、副準位選択性と TTA 速度を定量化する。特定の振動による分子内交換相互作用の揺らぎ運動で誘起される超高効率なスピン変換(五重項-一重項変換)が導く超高効率 TTA-UC 機構を解明する。

#### 4. 研究成果

本研究では、ITIC-Cl と呼ばれる近赤外光を吸収する非フラレン型アクセプタ分子の薄膜と、ルブレンと呼ばれる TTA を起こすドナー分子の非晶性薄膜で構成される二層平面型の固体 TTA-UC 材料を測定対象にした。720 nm パルスレーザー光を照射しながら、材料内部に生成した反応中間体の磁氣的性質をマイクロ波により検出する時間分解電子スピン共鳴法を用いて、光アップコンバージョンの素過程で生成する励起子の電子スピン状態を観測した。その結果、ルブレン中に生成した三重項励起子によるマイクロ波の吸収(A) および放出 (E) の信号をマイクロ秒の精度で検出することに成功した。この中間体は、近接するルブレン分子間をおよそ 1ns で移動しており、二つの三重項励起子同士が最接近した際に TTA 反応を起こし一重項励起子を生成することが分かった。この三重項励起子は、励起子拡散による回転で分子配向をランダムに変えながら運動し、三重項励起子同士の距離や配向が時々刻々と変化することによって、特異なマイクロ波の放出信号を与えることが示された。また、TTA 反応途中に形成される三重項励起子がペア (TT) となった状態のスピン多重度は、統計的な割合では 11%が一重項 TT (S-TT)、33%が三重項 TT (T-TT)、55%が五重項 TT (QTT)であるが、三重項励起子の運動についてモデル解析した結果、T-TT と Q-TT を S-TT に変化するスピン多重度変換が起きたことで、発光性の一重項励起子を 77%におよぶ効率で生じさせていることが判明した。このように三重項励起子の配向運動によるスピン双極子間相互作用の変調が、TTA 反応効率に重要な役割を果たすことが実験的に明らかとなりミクロな観点からの知見に基づく光アップコンバージョン材料設計指針を世界で初めて示すことができた。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計15件（うち査読付論文 15件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 7件）

1. 著者名 Jinnai Seihou, Murayama Kasumi, Nagai Keisuke, Mineshita Megumi, Kato Kosaku, Muraoka Azusa, Yamakata Akira, Saeki Akinori, Kobori Yasuhiro, Ie Yutaka	4. 巻 10
2. 論文標題 Effects of the rigid and sterically bulky structure of non-fused nonfullerene acceptors on transient photon-to-current dynamics	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Materials Chemistry A	6. 最初と最後の頁 20035 ~ 20047
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2TA02604J	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 Ohta Kaoru, Tominaga Keisuke, Ikoma Tadaaki, Kobori Yasuhiro, Yamada Hiroko	4. 巻 38
2. 論文標題 Microscopic Structures, Dynamics, and Spin Configuration of the Charge Carriers in Organic Photovoltaic Solar Cells Studied by Advanced Time-Resolved Spectroscopic Methods	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Langmuir	6. 最初と最後の頁 7365 ~ 7382
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.langmuir.2c00290	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Ito Hiroki, Yoshioka Daisuke, Hamada Morihiko, Okamoto Tsubasa, Kobori Yasuhiro, Kobayashi Yoichi	4. 巻 21
2. 論文標題 Photochromism of colloidal ZnO nanocrystal powders under ambient conditions	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Photochemical and Photobiological Sciences	6. 最初と最後の頁 1781 ~ 1791
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s43630-022-00256-6	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Sasikumar Devika, Takano Yuta, Zhao Hanjun, Kohara Reiko, Hamada Morihiko, Kobori Yasuhiro, Biju Vasudevanpillai	4. 巻 12
2. 論文標題 Caging and photo-triggered uncaging of singlet oxygen by excited state engineering of electron donor-acceptor-linked molecular sensors	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-022-15054-4	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 Sameshima Kaori, Kawakami Tomomi, Sotome Hikaru, Fuki Masaaki, Kobori Yasuhiro, Miyasaka Hiroshi	4. 巻 437
2. 論文標題 Dynamics and mechanism of radical formation in a highly sensitive oxime photoinitiator as revealed by time-resolved absorption and EPR measurements	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry	6. 最初と最後の頁 114479 ~ 114479
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jphotochem.2022.114479	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nakamura Shunta, Sakai Hayato, Fuki Masaaki, Ooie Rikuto, Ishiwari Fumitaka, Saeki Akinori, Tkachenko Nikolai V., Kobori Yasuhiro, Hasobe Taku	4. 巻 62
2. 論文標題 Thermodynamic Control of Intramolecular Singlet Fission and Exciton Transport in Linear Tetracene Oligomers	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202217704	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Xie Weibin, Xu Jiasheng, Md Idros Ubaidah, Katsuhira Jouji, Fuki Masaaki, Hayashi Masahiko, Yamanaka Masahiro, Kobori Yasuhiro, Matsubara Ryosuke	4. 巻 -
2. 論文標題 Metal-free reduction of CO2 to formate using a photochemical organohydride-catalyst recycling strategy	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Nature Chemistry	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41557-023-01157-6	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 Kawashima Yusuke, Hamachi Tomoyuki, Yamauchi Akio, Nishimura Koki, Nakashima Yuma, Fujiwara Saiya, Kimizuka Nobuo, Ryu Tomohiro, Tamura Tetsu, Saigo Masaki, Onda Ken, Sato Shunsuke, Kobori Yasuhiro, Tateishi Kenichiro, Uesaka Tomohiro, Watanabe Go, Miyata Kiyoshi, Yanai Nobuhiro	4. 巻 14
2. 論文標題 Singlet fission as a polarized spin generator for dynamic nuclear polarization	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-023-36698-4	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 Nagatomo Takaaki, Vats Ajendra K., Matsuo Kyohei, Oyama Shinya, Okamoto Naoya, Suzuki Mitsuharu, Koganezawa Tomoyuki, Fuki Masaaki, Masuo Sadahiro, Ohta Kaoru, Yamada Hiroko, Kobori Yasuhiro	4. 巻 3
2. 論文標題 Nonpolymer Organic Solar Cells: Microscopic Phonon Control to Suppress Nonradiative Voltage Loss via Charge-Separated State	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Physical Chemistry Au	6. 最初と最後の頁 207 ~ 221
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acspchemau.2c00049	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 Nagaoka Tomoki, Matsui Yasunori, Fuki Masaaki, Ogaki Takuya, Ohta Eisuke, Kobori Yasuhiro, Ikeda Hiroshi	4. 巻 7
2. 論文標題 Diphenylidihydropentalenediones: Wide Singlet-Triplet Energy Gap Compounds Possessing the Planarly Fixed Diene Subunit	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 40364 ~ 40373
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.2c05341	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 Hayasaka Ryo, Sakai Hayato, Fuki Masaaki, Okamoto Tsubasa, Khan Ramsha, Higashi Masahiro, Tkachenko Nikolai V., Kobori Yasuhiro, Hasobe Taku	4. 巻 63
2. 論文標題 The Effect of Torsional Motion on Multiexciton Formation through Intramolecular Singlet Fission in Ferrocene Bridged Pentacene Dimers	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 e2023157
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202315747	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Yamauchi Akio, Tanaka Kentaro, Fuki Masaaki, Fujiwara Saiya, Kimizuka Nobuo, Ryu Tomohiro, Saigo Masaki, Onda Ken, Kusumoto Ryota, Ueno Nami, Sato Harumi, Kobori Yasuhiro, Miyata Kiyoshi, Yanai Nobuhiro	4. 巻 10
2. 論文標題 Room-temperature quantum coherence of entangled multiexcitons in a metal-organic framework	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Science Advances	6. 最初と最後の頁 eadi3147
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1126/sciadv.adi3147	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 Usui Kazuteru, Amano Ami, Murayama Kasumi, Sasaya Miho, Kusumoto Ryota, Umeno Tomohiro, Murase Satsuki, Iizuka Naoko, Matsumoto Shota, Fuchi Yasufumi, Takahashi Kazuyuki, Kawahata Masatoshi, Kobori Yasuhiro, Karasawa Satoru	4. 巻 29
2. 論文標題 Photoisomerization of "Partially Embedded Dihydropyridazine" with a Helical Structure	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Chemistry- A European Journal	6. 最初と最後の頁 e202303311
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.202302413	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Oya Ryoto, Ota Kenji, Fuki Masaaki, Kobori Yasuhiro, Higashi Masahiro, Nagao Kazunori, Ohmiya Hirohisa	4. 巻 14
2. 論文標題 Biomimetic design of an $\alpha$ -ketoacylphosphonium-based light-activated oxygenation auxiliary	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Chemical Science	6. 最初と最後の頁 10488 ~ 10493
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D3SC03572G	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Okamoto Tsubasa, Izawa Seiichiro, Hiramoto Masahiro, Kobori Yasuhiro	4. 巻 15
2. 論文標題 Efficient Spin Interconversion by Molecular Conformation Dynamics of a Triplet Pair for Photon Up-Conversion in an Amorphous Solid	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 2966 ~ 2975
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.3c03602	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計24件 (うち招待講演 10件 / うち国際学会 9件)

1. 発表者名 Yasuhiro Kobori
2. 発表標題 Water Dynamics Control of Charge Separation for Magnetoreception by Cryptochrome
3. 学会等名 Gordon Research Conference, Quantum Biology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yasuhiro Kobori
2. 発表標題 Conformations of Exciton Pairs Associated with Spin-Entanglement Transports during Singlet Fissions
3. 学会等名 ECS Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yasuhiro Kobori
2. 発表標題 Conformation Change of Exciton Pairs: Spin-Entanglement Transport during Singlet Fissions Studied by Time-Resolved EPR
3. 学会等名 Spin Chemistry Meeting (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Spin-Entanglement Transport during Singlet Fissions
2. 発表標題 Spin-Entanglement Transport during Singlet Fissions
3. 学会等名 Asia Pacific EPR/ESR Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小堀康博
2. 発表標題 金属有機構造体の励起子分裂による多重励起子のスピン量子操作
3. 学会等名 光化学討論会2022
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小堀康博
2. 発表標題 分子ゆらぎが起こす低分子有機太陽電池の電圧損失:時間分解 EPR 法による長距離電荷再結合機構
3. 学会等名 第61回電子スピンサイエンス学会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 婦木正明、小堀康博
2. 発表標題 テトラセン分子ワイヤーにおける一重項分裂で生成した三重項状態
3. 学会等名 2022年光化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 婦木正明、小堀康博
2. 発表標題 テトラセン分子ワイヤーにおける一重項分裂で生成した多重励起子と解離状態
3. 学会等名 第61回電子スピンサイエンス学会年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Tsubasa Okamoto, Yasuhiro Kobori
2. 発表標題 Exciton Dynamics on Triplet-Triplet Annihilation Upconversion in Organic Semiconductors Revealed by Time-Resolved EPR
3. 学会等名 61st Rocky Mountain Conference on Magnetic Resonance (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 岡本翔、小堀康博
2. 発表標題 9,10-ジフェニルアントラセンを用いた光アップコンバージョン材料における三重項 - 三重項消滅過程のスピンドイナミクス
3. 学会等名 2022年光化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 岡本翔、小堀康博
2. 発表標題 9,10-ジフェニルアントラセンにおける三重項 三重項消滅過程の電子スピンドイナミクス
3. 学会等名 第61回電子スピンドイナミクス学会年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 岡本翔、小堀康博
2. 発表標題 電子スピンドイナミクスを用いた液体光アップコンバータに生成する三重項励起子のダイナミクス解析
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会(2023)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 楠本遼太、小堀康博
2. 発表標題 分子内一重項励起子分裂で生成する多重励起子の低温領域での構造変化:時間分解EPR法による解析
3. 学会等名 2022年光化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 楠本遼太、小堀康博
2. 発表標題 分子内一重項励起子分裂で生成する多重励起子の解離機構と構造変化:時間分解EPR法を用いた解析
3. 学会等名 動的エキシトン-第一回若手シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 楠本遼太、小堀康博
2. 発表標題 分子内一重項励起子分裂で生成する多重励起子の低温での構造変化とその機構:時間分解ESR法を用いた解析
3. 学会等名 第61回電子スピンサイエンス学会年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 村山加純、小堀康博
2. 発表標題 Non-Fullerene Organic Photovoltaic: Effect of Introducing Spirofluorene Substituent to Acceptor on the Photoinduced Charge Separation Structure
3. 学会等名 2022年光化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 村山加純、小堀康博
2. 発表標題 ESRによる非フラーレン型有機薄膜太陽電池における電荷輸送機構の解析
3. 学会等名 第61回電子スピンサイエンス学会年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yasuhiro Kobori
2. 発表標題 Non-Polymer Organic Solar Cells: Microscopic Phonon Control to Suppress Non-Radiative Voltage Loss via Charge-Separated State
3. 学会等名 ECS Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yasuhiro Kobori
2. 発表標題 Key conformation dynamics for light-induced energy conversions: Transient EPR study
3. 学会等名 The 31st International Conference on Photochemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yasuhiro Kobori
2. 発表標題 Spin-state dynamics and anisotropies in organic solar cells using transient EPR
3. 学会等名 The 8th International Symposium on Dynamic Exciton (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yasuhiro Kobori
2. 発表標題 Molecular conformation dynamics effect in singlet-fissions
3. 学会等名 The 9th International Symposium on Dynamic Exciton (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 小堀康博
2. 発表標題 光エネルギー変換への鍵となる分子配向と低周波振動:時間分解EPRによる観測
3. 学会等名 2023年光化学討論会(招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yasuhiro Kobori
2. 発表標題 Photoinduced spin entanglement and decoherence in functionality of complex molecular systems
3. 学会等名 第73回錯体化学討論会(招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 小堀康博
2. 発表標題 ゆらぎによる励起子ペアのスピン偏極
3. 学会等名 第2回DNP研究会(招待講演)
4. 発表年 2024年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 小堀康博	4. 発行年 2024年
2. 出版社 エヌ・ティー・エス	5. 総ページ数 10
3. 書名 量子生命科学ハンドブック	

〔産業財産権〕

〔その他〕

希少金属を使用しないCO2変換法を開発 カarbonニュートラル実現に期待  
[https://www.kobe-u.ac.jp/research\\_at\\_kobe/NEWS/news/2023\\_03\\_24\\_01.html](https://www.kobe-u.ac.jp/research_at_kobe/NEWS/news/2023_03_24_01.html)  
 水を高核偏極化する色素材料の開発に成功:一重項励起子分裂の新しい応用を提案  
[https://www.kobe-u.ac.jp/research\\_at\\_kobe/NEWS/news/2023\\_03\\_01\\_01.html](https://www.kobe-u.ac.jp/research_at_kobe/NEWS/news/2023_03_01_01.html)  
 光吸収による励起子反応効率200%を実現する材料設計の新概念を実証  
[https://www.kobe-u.ac.jp/research\\_at\\_kobe/NEWS/news/2022\\_01\\_13\\_02.html](https://www.kobe-u.ac.jp/research_at_kobe/NEWS/news/2022_01_13_02.html)  
 光アップコンバージョンには中間体の回転が重要だった！ 高効率な光エネルギー変換デバイスの実現へ  
<https://www.kobe-u.ac.jp/ja/news/article/20240314-21796/>

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
--	---------------------------	-----------------------	----

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		
フィンランド	Tampere University		