

PRESS RELEASE (2026/03/25)

一重項分裂 (SF) により増幅した励起子の効率的な捕集に成功

～量子収率 130%を達成する鍵分子を発見、太陽電池の限界突破に道～

ポイント

- ① 1つの光子から2つの励起子(※1)を生み出す「シングレットフィッション (SF、一重項分裂) (※2)」は、従来型の太陽電池の理論限界を突破し、有機発光ダイオード (OLED) の効率を向上する夢の光変換技術として期待されています。
- ② 本研究では、その SF によって増幅した励起子を光エネルギーとして抽出するためにスピントリップ発光体と呼ばれる「d 電子系金属錯体 (※3)」を活用する新しい手法を開発し、従来系の理論限界 (100%) を大きく超える約 130%の量子収率 (※4) を達成しました。
- ③ 分子設計の自由度の高い錯体を用いた本技術により、今後太陽電池の効率向上が期待されます。

概要

太陽光エネルギーの効率的な活用戦略として、光吸収により生じる一重項励起子が分裂して2つの三重項(※5)励起子が形成される SF が注目され、世界中で研究されています。分裂後の三重項励起子から電子を取り出せば、原理的に光電変換効率 200%を達成できるものの、分裂前の一重項(※5)からのエネルギー損失過程が競合するため、変換効率を最大化することは困難です。そこで分裂後に生じる励起三重項エネルギーを高効率に受け取る分子が求められていました。

今回、九州大学大学院工学研究院の君塚信夫教授(現 ネガティブエミッションテクノロジー研究センター 特任教授/名誉教授)、佐々木陽一准教授、同大学工学部の Sifuentes-Samanamud Percy Gonzalo 学部生(当時)、同大学院工学府の正岡亜樹大学院生、マインツ大学の Sauer Adrian 大学院生らは、d 電子系金属錯体であるモリブデン錯体をエネルギーアクセプター(※6)として活用し、SF 後の励起子からのスピン状態選択的なエネルギー移動を、溶液系において実現しました。モリブデン錯体の近赤外発光を用いた定量評価より、一般的な三重項増感の限界を超えた約 130%のモリブデン励起二重項(※5)収量を確認するとともに、SF 後のスピン量子もつれ三重項対 (Triplet pair) (※7)からの三重項エネルギー移動過程の寄与を明らかにしました。これらの結果はモリブデン錯体のような d 電子系金属錯体が、SF 後の増感効率向上に適した分子群であることを示しており、将来的に従来限界を超えた効率を示す太陽光発電や発光ダイオードへの応用が期待されます。

本研究成果は、2026年3月25日(水)午後11時(日本時間)に米国の国際学術誌「Journal of the American Chemical Society」にオンライン掲載されました。

本研究グループからひとこと：

応用化学部門が進めていた九大-マインツ大交換留学プログラムがきっかけとなり、SF (九大) と d 電子系金属錯体 (マインツ大) の化学を融合した本研究がスタートしました。今後光電変換デバイスの作製を進め、太陽光発電への応用を見据えた国際共同研究を展開していきます。



(左から) Sifuentes-Samanamud、Sauer、正岡、Heinze、佐々木、君塚

【研究の背景と経緯】

現在、広く普及しているシリコン太陽電池や光センサーなどの光変換デバイスには、「ショックレー・クワイサー限界（※8）」と呼ばれるエネルギー変換効率の理論的な上限が存在します。これは通常、物質が1つの光の粒（光子）を吸収した際、生み出せる励起子・電子が「最大でも1つ」であることに起因します。青色光のような高いエネルギーをもつ光を吸収しても、余剰なエネルギーは熱として失われてしまうのが長年の課題でした。

このショックレー・クワイサー限界を突破する夢の技術として世界中で注目を集めているのが、シングルレットフィッシュン（SF）と呼ばれる光物理現象です（図1）。これは、特定の有機分子が光を吸収した際、1つの高いエネルギーをもつ励起子（一重項励起子）を2つの低いエネルギーをもつ励起子（三重項励起子）に「分裂」させる現象であり、光のエネルギーを無駄なく使い切ることにつながるため、デバイスの効率を劇的に飛躍させる可能性を秘めています。

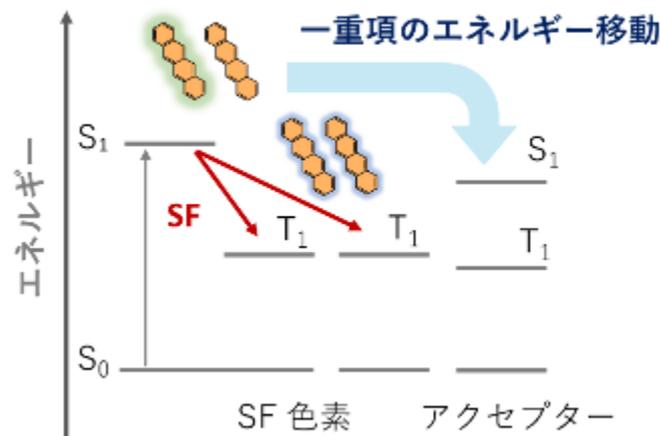


図1 SF材料のエネルギーダイアグラム。SF材料においては、1光子で2つの励起子を生成できるため、太陽電池のショックレー・クワイサー限界を克服できる。エネルギーアクセプターへの一重項エネルギー移動を回避したエネルギー準位設計が重要となる。

しかし、このSF技術を実際のデバイスに応用するには、増幅した励起子をエネルギーアクセプター（受容体）となる発光体などへ損失なく受け渡す必要があります。シリコンの増感に用いられているテトラセン誘導体においては、分裂する前の一重項励起子から、受け手側がエネルギーを横取りしてしまう現象が起きやすく効率が大きく低下していました（図1）。量子ドット（※9）や希土類錯体を用いた解決案も提案されてきましたが、材料の凝集による劣化や、エネルギー準位の緻密な制御が難しいなどの課題があり、分裂後の励起子からのエネルギー移動を高効率化する新しい材料の探索が急務となっていました。

【研究の内容と成果】

本研究グループは、上記の課題を根本から解決するため、全く新しいアプローチとして、モリブデン（Mo）を中心金属とした「スピンドリップ発光体」というd電子系金属錯体に着目し、これをエネルギーの受け手（アクセプター）として採用しました。今回焦点を当てたd電子系金属錯体は、中心となる金属やその周囲を取り囲む有機分子（配位子（※10））の分子構造を変えることで、物質の安定性やエネルギー準位を極めて柔軟に設計できるという大きな特徴を持っています。組み合わせるSF材料（テトラセンなど）に合わせて化学修飾による相溶性の設計も可能であるため、汎用（はんよう）性の高い理想的なエネルギー受容体となり得ます。

本研究の最大のブレイクスルーは、この最適設計されたモリブデン錯体が、スピン状態選択的にエネルギーを抽出するフィルターとして機能することを初めて見出した点にあります (図 2)。実験の結果、この錯体は「分裂前の一重項励起子」からの一重項エネルギー移動を回避でき、分裂・増幅後の「2つの三重項励起子」からスピン状態選択的にエネルギーを受け取れることが実証されました。様々な分子間距離に固定されたテトラセン二量体 (SF 材料) とモリブデン錯体 (発光体) を溶かした溶液系において、発光の量子収率を測定した結果、3種類の異なる分子でそれぞれ $112 \pm 6\%$ 、 $132 \pm 2\%$ 、 $128 \pm 4\%$ という値が得られました。これは、従来の光変換プロセスにおける理論上の上限「100%」を明確に突破し、かつ1つの光子から複数の励起子を生成・抽出することに成功するとともに、効率のよいエネルギー抽出を可能にする SF 分子の設計指針を明らかにしたものです。

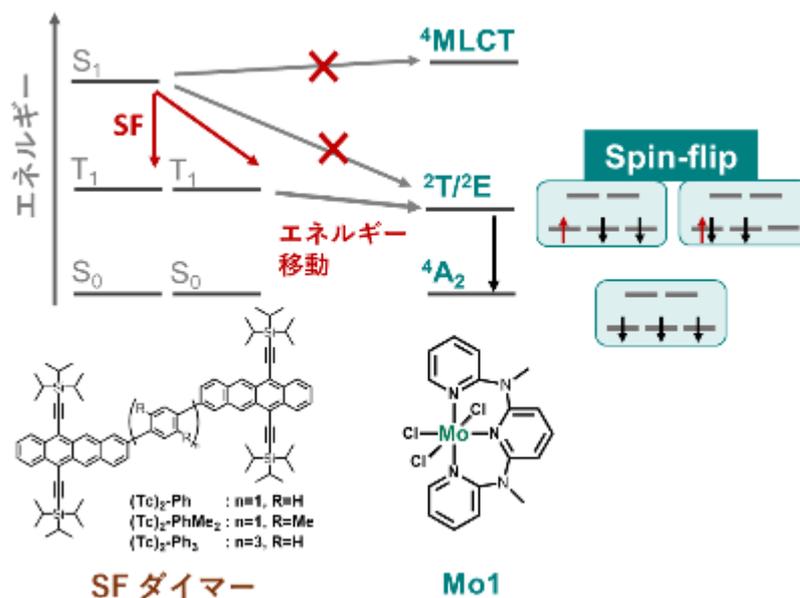


図 2 モリブデン錯体を活用した SF ダイマーからのエネルギー移動のスキーム。スピン許容な金属から配位子への電荷移動遷移 (Metal-to-Ligand Charge Transfer, MLCT) とスピン禁制なスピントリップ遷移 (※11) の大きなエネルギー差により、スピン状態選択的なエネルギー移動を設計できる。

さらに、詳細な評価により、モリブデン錯体が高濃度で存在する場合、分裂後に一時的に形成されるスピン量子もつれ三重項対の状態からもエネルギーが受け渡されることも明らかになりました（図3）。この結果は、SFダイマーを増感剤として用い、スピンフリップ発光体としてモリブデン錯体を使用することが、量子収率低下の原因となる三重項対の再結合を防ぐための重要な戦略となることを示しています。今回得られたモデル溶液系での結果をもとに、固体材料系において励起状態のダイナミクスを最適化していくことで、理想的なSF型太陽電池の設計指針が明らかになると期待されます。

本成果は、高い設計自由度を有するd電子系金属錯体と、適切に分子設計されたSF材料との組み合わせにおいて「光子（励起子）の増幅」を実現する新しい概念ならびに方法論を提案したものです。

【今後の展開】

本研究で焦点を当てたd電子系金属錯体は、中心金属・配位子によってエネルギー準位を柔軟に設計できることが特徴です。この強みを活かし、今後はさらに高効率なエネルギー移動過程の設計を進めます。また、本研究は溶液中での基礎的なメカニズムの実証でしたが、実際のデバイスに应用するために、固体状態（薄膜など）における高効率なエネルギー移動の実現と、実際の太陽電池への組み込みを目指し、実用化に向けた研究を一層加速させていく予定です。

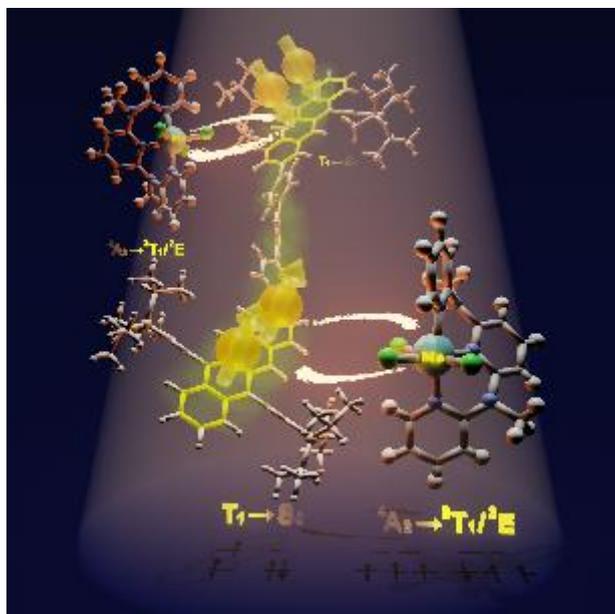


図3 スピン量子もつれ三重項対からのエネルギー移動のイメージ

【用語解説】

(※1) 励起子

クーロン引力の相互作用により結びついている電子・正孔のペア。

(※2) シングレットフィッション (SF、一重項分裂)

特定の有機分子において、1つの光子（光の粒）を吸収して生まれた1つの高いエネルギーを有する一重項励起子が、隣接する分子とエネルギーを分け合い、2つの低いエネルギーを有する三重項励起子に分裂する現象。

(※3) 金属錯体

中心に金属イオンをもち、その周囲を別の分子（配位子）が取り囲んだ構造をもつ化合物。

(※4) 量子収率

物質が吸収した光子（光の粒）の数に対して、目的とする反応が起きた割合を示す指標。

(※5) 一重項・二重項・三重項

物質中の電子のスピンの（自転）の向きの組み合わせによって分類されるエネルギー状態。

(※6) エネルギーアクセプター

光を吸収した他の分子（ドナー）から、エネルギーを受け取る役割をもつ分子のこと。

(※7) スピン量子もつれ三重項対 (Triplet pair)

シングレットフィッションによって生じる、スピン量子もつれ状態にある2つの三重項励起子のペアのこと。シングレットフィッション直後では磁性のない一重項状態の三重項対が形成し、五重項や三重項状態へと時間発展する。

(※8) ショックレー・クワイサー限界

現在主流となっているシリコン太陽電池などが光を電気に変換する際の、理論上の最大効率（約30%強）のこと。

(※9) 量子ドット

電子が狭い空間（数ナノ～数十ナノメートル程度）に閉じ込められ、移動が制限された状態にある半導体ナノ結晶。

(※10) 配位子

金属錯体の中心にある金属イオンに結合している分子のこと。

(※11) スピンフリップ遷移

特定の金属錯体を示す、電子のスピンの向きが反転（フリップ）しながら吸収・発光する特殊な遷移。

【謝辞】

本研究は、科学技術振興機構（JST） 戦略的創造研究推進事業 ACT-X（JPMJAX24D8）、JST 先端国際共同研究推進事業（ASPIRE）（JPMJAP2508）、日本学術振興会（JSPS） 科研費（JP20H05676, JP24K17745）、稲盛財団研究助成、the Priority Program SPP 2102 “Light-controlled reactivity 7 of metal complexes”（grant number HE2778/15-2）、DAAD（ISAP project 57668110）の助成を受けたものです。

【論文情報】

掲載誌：Journal of the American Chemical Society

タイトル：Exploring Spin-State Selective Harvesting Pathways from Singlet Fission Dimers to a Near-Infrared-Emissive Spin-Flip emitter

著者名：Percy Gonzalo Sifuentes-Samanamud, Adrian Sauer, Aki Masaoka, Yuta Sawada, Yuya Watanabe, Ilias Papadopoulos, Katja Heinze,* Yoichi Sasaki,* Nobuo Kimizuka*

D O I : 10.1021/jacs.5c20500

【お問合せ先】

<研究に関すること>

九州大学 大学院工学研究院応用化学部門 准教授 佐々木陽一（ササキヨウイチ）

TEL：092-802-2833

Mail：sasaki.yoichi.772@m.kyushu-u.ac.jp

<報道に関すること>

九州大学 広報課

TEL：092-802-2130 FAX：092-802-2139

Mail：koho@jimu.kyushu-u.ac.jp

科学技術振興機構 広報課

TEL：03-5214-8404 FAX：03-5214-8432

Mail：jstkoho@jst.go.jp

<JST 事業に関すること>

科学技術振興機構 戦略研究推進部 先進融合研究グループ 原田千夏子（ハラダチカコ）

TEL：03-6380-9130 FAX：03-3222-2066

Mail：act-x@jst.go.jp