

## 時間分解イメージングと数値シミュレーションによる熱活性化遅延蛍光材料中の negative diffusion の検証

(大阪大学<sup>1</sup>・京都大学<sup>2</sup>) ○米田英範<sup>1</sup>・五月女 光<sup>1</sup>・保田悠花<sup>2</sup>・奥村亮祐<sup>2</sup>・伊都将司<sup>1</sup>・梶 弘典<sup>2</sup>・宮坂 博<sup>1</sup>

Verifying Negative Exciton Diffusion in a Thermally Activated Delayed Fluorescence Material with Time-Resolved Imaging and Numerical Simulation (<sup>1</sup>Osaka University, <sup>2</sup>Kyoto University) Hidenori Yoneda,<sup>1</sup> Hikaru Sotome,<sup>1</sup> Yuka Yasuda,<sup>2</sup> Ryosuke Okumura,<sup>2</sup> Syoji Ito,<sup>1</sup> Hironori Kaji,<sup>2</sup> Hiroshi Miyasaka<sup>1</sup>

Spatiotemporal diffusion of excitons and charge carriers plays a crucial role in photo-energy conversion systems such as solar cells and light emitting devices. In the present work, using time-resolved fluorescence imaging, we evaluated diffusion dynamics of singlet and triplet excitons in MA-TA crystals, which is one of thermally activated delayed fluorescence (TADF) materials. The mean square displacement (MSD) of excitons in the MA-TA crystals increased with time upto 50 ns from photoexcitation, then it showed a partial decrease after 50 ns. This result implies the negative diffusion of the excitons: the excitons were spatially concentrated in the center of the photoexcitation spot, which was verified with numerical simulations on the exciton diffusion.

*Keywords; Thermally Activated Delayed Fluorescence, Exciton Diffusion, Time-Resolved Imaging, Numerical Simulation, Heterogeneity*

熱活性化遅延蛍光 (TADF) 材料は、電荷再結合によって生成される三重項励起子を効率的に活用することで、原理的に 100% の内部量子効率を達成可能な次世代型発光材料として注目されている。これらの材料における励起子や電荷キャリアの時空間的拡散挙動は、光電変換効率を左右する重要な因子である。本研究では、TADF 分子である MA-TA (Fig. 1a) の結晶中における一重項および三重項励起子の拡散挙動を時間分解蛍光イメージングを用いて評価した。その結果、光励起後、数十ナノ秒の時間スケールでは、励起子は時間とともに光照射スポットから外部に拡散する様子が観測された (Fig. 1b)。一方興味深いことに、50 ns 以降では励起子の空間分布幅を示す平均二乗変位 (MSD) が減少に転じた (Fig. 1c)。この現象は、励起子が高濃度の高い方向に濃縮される negative diffusion に対応し、数値シミュレーションによっても再現された。発表では、この negative diffusion の発現機構について詳細に議論する。

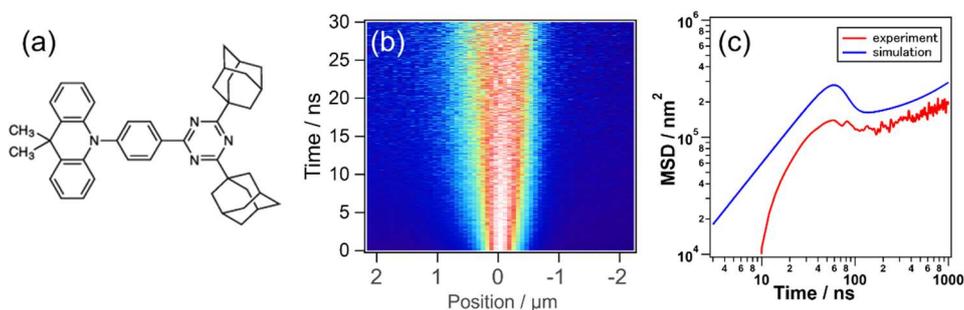


Fig. 1. (a) Chemical structure of MA-TA. (b) Exciton distribution in a MA-TA crystal plotted as functions of position and time in nanosecond time scale. (c) Time evolutions of mean square displacement of singlet excitons obtained from the experiment and simulation.