

Press release**Max-Planck-Institut für Struktur und Dynamik der Materie****Jenny Witt**

09/21/2020

<http://idw-online.de/en/news754468>Research results, Scientific Publications
Electrical engineering, Energy, Materials sciences, Physics / astronomy
transregional, national**Intermolekulare Schwingungen öffnen Kanäle für ultraschnelle Singulettexzitonenspaltung**

Die Suche nach leistungsstarken neuen Materialien zur Gewinnung von Solarenergie ist ein wichtiger Forschungsschwerpunkt weltweit. Ein solches Material ist Pentacen, da es sich durch seine ultraschnelle "Singulettexzitonenspaltung" auszeichnet – einen potentiell wichtigen Prozess für die Entwicklung neuartiger Solarzellen. Nun hat ein internationales Forschungsteam unter der Leitung von Wissenschaftlern des MPSD die Singulettexzitonenspaltung in Pentacen bis ins Detail untersucht und überraschende Erkenntnisse erlangt.

Die Versuche des Teams zeigen, dass Pentacenmoleküle charakteristische Schaukelbewegungen und spezifische Vibrationen entwickeln, sobald das Material Licht absorbiert. Diese Bewegungen spielen bei der Umwandlung des Lichts in elektrische Energie in Solarzellen eine entscheidende Rolle.

Die Arbeit wurde kürzlich in Science Advances veröffentlicht. Das Team bestand aus Forschern des MPSD und der Universität Hamburg, der Stanford University und des SLAC National Accelerator in den USA, der Universität Oxford (Großbritannien), des TIFR Centre for Interdisciplinary Sciences (Indien), der Universität Peking in China und der Universität Toronto (Kanada). Wissenschaftler des Exzellenzclusters CUI : Advanced Imaging of Matter und des Center for Free-Electron Laser Science (CFEL) waren Teil des Hamburger Forschungsteams.

Jedes natürliche und synthetische System, das die Energie der Sonne umwandelt – von den Blättern eines Baumes bis hin zu photovoltaischen Zellen – nutzt hierzu ultraschnelle Prozesse auf atomarer und molekularer Ebene. Diese Prozesse beinhalten die korrelierte Entwicklung der Schwingungs- und elektronischen Freiheitsgrade dieser Moleküle. Trotz der erstaunlichen Fortschritte in der ultraschnellen optischen Spektroskopie sind die damit einhergehenden strukturellen Veränderungen während dieser Prozesse immer noch nicht vollständig verstanden.

Um diese Veränderungen bis ins kleinste Detail zu erforschen, untersuchte das Forschungsteam um Hong-Guang Duan und Ajay Jha vom MPSD das Verhalten der Pentacenmoleküle während der Singulettexzitonenspaltung. Sie konzentrierten sich dabei auf die Veränderungen des Moleküls während der Erzeugung des so genannten Triplett- oder Dreifach-Paarzustands: Der Phase zwischen der Absorption von Sonnenlicht und der Bildung des Produktzustands, der schließlich zu Ladungen führt. Dieser Schritt erfolgt in wenigen hundert Femtosekunden, wobei eine Femtosekunde ein Millionstel einer Milliardstel Sekunde ist.

Das Team untersuchte diesen unvorstellbar schnellen Prozess mithilfe der TG-Spektroskopie, einer ultrasensiblen Technik, bei der ein Paar Laserpulse das Material stimuliert und ein zweites Paar Pulse die detaillierten Veränderungen des Moleküls auf diesen ultrakurzen Zeitskalen zeigt.

Die Forscher entdeckten, dass Vibrationen der Pentacenmoleküle eine entscheidende Rolle bei der Entstehung des Dreifach-Paarzustands spielen. Die Moleküle führen eine Schaukelbewegung aus, sowohl einzeln als auch gemeinsam.

Es gelang den Wissenschaftler*innen, die besondere Schwingungsdynamik im Pentacenmolekül während dieser Phase aufzuzeichnen.

Die beobachteten Bewegungen spielen eine Schlüsselrolle in der Singulettexzitonenspaltung in diesem Material. In ihrer Suche nach neuartigen photoaktiven Materialien, die Pentacen nachahmen, können Wissenschaftler sich nun auf diese Mechanismen stützen. Die Arbeit des Teams ebnet den Weg für die Entwicklung von Solarenergiesystemen, in denen die Nutzung intermolekularer Schwingungen ein wichtiges Konstruktionsprinzip darstellt.

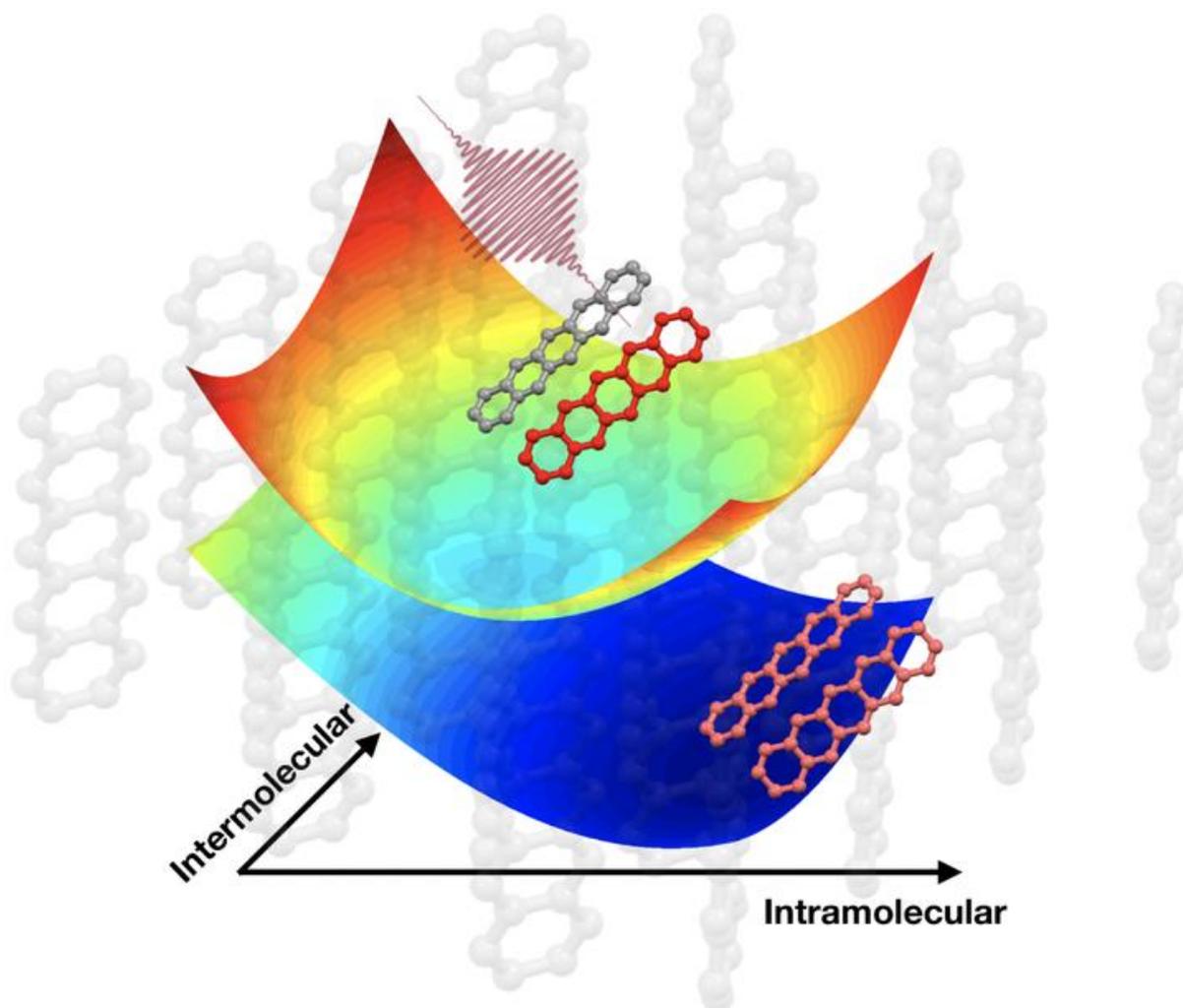
contact for scientific information:

Hong-Guang Duan, Erstautor: hong-Guang.duan@mpsd.mpg.de

Original publication:

<https://advances.sciencemag.org/content/6/38/eabbo052>

URL for press release: <https://www.mpsd.mpg.de/469221/2020-09-guang-singletfission>



Quantenvibrationskohärenzen sind Treiber in der Singulettexzitonenspaltung
Hong-Guang Duan

