
大连化物所揭示无机有机界面三线态能量转移的“Through-space”与“Through-bond”机制

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/10796.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近日，中国科学院大连化学物理研究所光电材料动力学特区研究组研究员吴凯丰团队，通过同时调控无机半导体纳米晶的波函数分布和表面受体分子的构型，采用时间分辨光谱，观测到无机/有机界面三线态能量转移中的“Through-space”与“Through-bond”机制，并基于此实现高效的分子三线态敏化和三线态湮灭的光子上转换。

近年来，无机纳米晶到有机分子的三线态能量转移被发展为一种新型、高效的分子三线态敏化方法，在光子上转换、光催化合成以及光动力疗法等领域有潜在应用价值。吴凯丰团队近期研究无机/有机界面三线态能量转移的动力学机制，揭示纳米晶量子限域效应驱动三线态能量转移 ([J. Am. Chem. Soc.](#), 2019)，界面电荷分离态介导的三线态能量转移 ([Nat. Commun.](#), 2020；[J. Am. Chem. Soc.](#), 2020；[J. Am. Chem. Soc.](#), 2020)，以及纳米晶表面缺陷态激子参与的三线态能量转移 ([J. Am. Chem. Soc.](#), 2019)。

该研究进一步揭示分子层面的无机/有机界面三线态能量转移机理。研究工作受到一个实验现象的启发：对同一个纳米晶，以不同羧基修饰位点的蒽甲酸（2-蒽甲酸和9-蒽甲酸）作为三线态受体时，能量转移效率差别可达一个数量级以上。考虑到2-蒽甲酸和9-蒽甲酸的氧化还原电势和带隙相似，转移效率的差异只能来源于纳米晶与2-蒽甲酸和9-蒽甲酸之间不同的电子耦合强度。研究团队通过调控无机纳米晶的尺寸和核/壳结构来改变纳米晶表面的波函数幅度，调控纳米晶与分子间的电子耦合强度，并结合超快光谱观测这种调控对三线态能量转移动力学的影响。

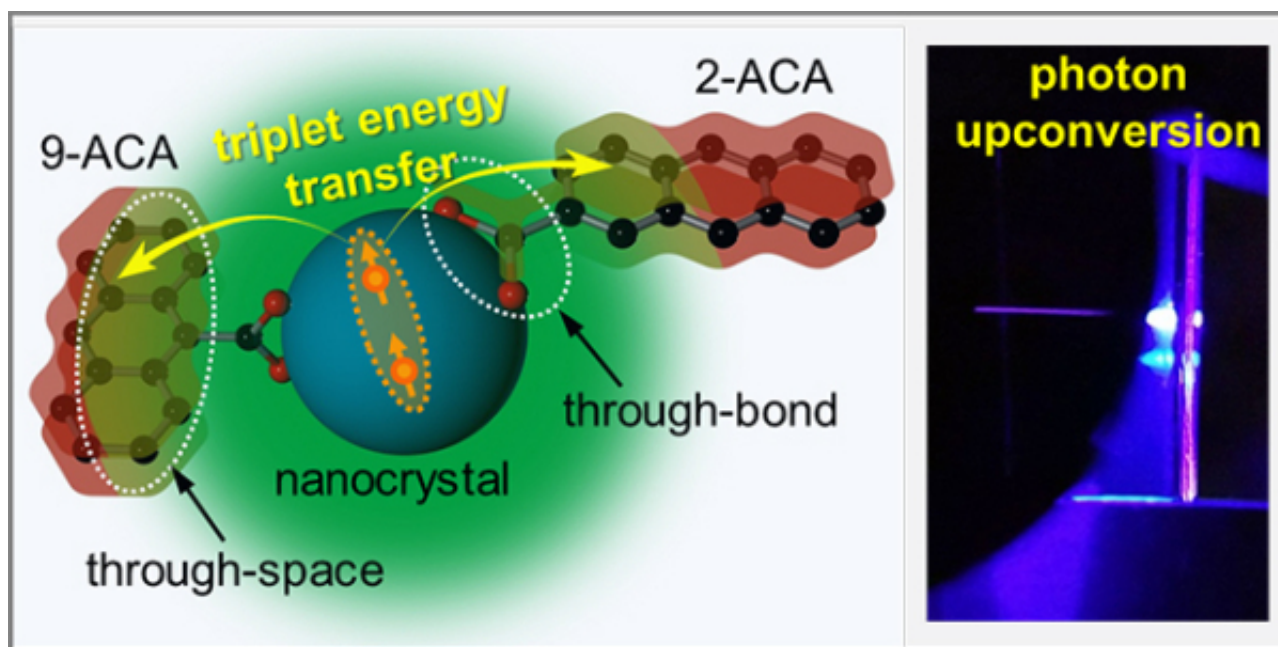
研究表明，由于2-蒽甲酸中羧基锚定基团与蒽分子成平面结构，两者间存在化学共振效应，纳米晶与2-蒽甲酸的波函数交叠被羧基锚定基团有效增强，类似于电荷和能量转移体系中的“Through-bond”（通过化学键）机制；相反，9-蒽甲酸中羧基锚定基团与蒽分子成垂直结构，不存在化学共振效应，纳米晶与蒽分子的耦合只能以“Through-space”（通过空间）方式进行。因此，对于弱限域（或者壳层包覆）的纳米晶，波函数“溢出”到表面的程度低，“Through-bond”机制的作用导致纳米晶与2-蒽甲酸的电子耦合强度远大于9-蒽甲酸；而对于强限域（波函数“溢出”程度高）的纳米晶，“Through-space”起到主导作用，此时，由于纳米晶与9-蒽甲酸中蒽分子的距离较2-蒽甲酸更近，前者反而具有更大的电子耦合强度。基于此，研究团队通过同时调控纳米晶的波函数分布和蒽甲酸分子的构型，将基于该体系的三线态湮灭的光子上转换效率提升一个数量级以上。

该研究首次从分子层面揭示无机纳米晶到有机分子的三线态能量转移存在“Through-space”与“Through-

bond”两种方式，为提升三线态能量转移效率和三线态湮灭光子上转换效率提供指导意义。

相关研究成果发表在《德国应用化学》（[Angew. Chem. Int. Ed.](#)

）上。研究工作得到国家自然科学基金、中科院战略性先导科技专项（A类）“变革性洁净能源关键技术及示范”、辽宁省兴辽英才计划等的资助。



大连化物所揭示无机/有机界面三线态能量转移的“Through-space”与“Through-bond”机制

研究团队单位：大连化学物理研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](#)转发