宁波材料所近红外热活化延迟荧光材料与器件研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/19623.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！

近红外有机发光二极管（NIR-OLEDs）在生物成像、防伪、传感器、远程医疗、显微摄影、夜视显示等方面颇具实际应用价值，已成为有机电致发光器件的重要发展方向之一，而热活化延迟荧光（TADF）材料可以实现100%激子利用率，其量子效率可媲美基于贵重金属的磷光材料，具有应用潜力。受能隙定律的影响，近红
外发光材料的基态（S_0）和第一单态激发态（S_1
）势能面接近，近红外发光材料普遍存在严重的非辐射失活现象，在聚集态中表现得尤为严重。非掺杂器件在面板显示和一般照明应用中具有良好的重复性、高稳定性和低成本等优点以及商业化潜力。鉴于TADF材料具有强的分子内电荷转移（ICT）特征，在非掺杂条件下可较易获得深红色甚至近红外发射，因此亟需开发出光亮的NIR-TADF非掺杂材料。

近日，中国科学院宁波材料技术与工程研究所研究员葛子义和副研究员李伟等开发了一种在非掺杂条件下即可实现高效率的NIR-TADF，基于该材料的NIR-OLED最大外量子效率为9.44%，发光峰位于711nm，是目前已报道的基于TADF材料的NIR-OLED最高效率之一。科研团队探究了TADF材料的材料结构、发光特性与聚集态之间的关系。一般认为，非晶态薄膜的无序程度高于有序排列的单晶，薄膜中光团的光致发光量子产率（PLQYs）普遍高于晶体态。已知TADF分子的非辐射淬灭主要受Dexter能量传递（DET）机制主导下的分子间电子交换作用。DET过程的短程特性，在高浓度下会发生激子湮灭，故分子填充模式的微小变化可能对光电子性能产生影响，甚至决定光团的光物理性能。因此，研究团队设计了T-β-IQD单晶来深入探究材料在结晶态和未掺杂态下的高发光量子产率的机理。x射线晶体学分析表明，T-β-IQD具有面对面的堆积结构，且相邻有较大的层间滑动，TIQD晶体呈“头尾”排列。根据Kasha激子模型，T-β-IQD的二聚体跃迁偶极子与对应偶极子对齐方向的夹角（θ）分别为24.92°，为J型聚集体形式，可以提高辐射衰减率。在T-β-IQD晶体中，同时存在分子内和分子间CN···H-C和C-H···π协同作用（图1）。这种适度的分子内C-H···π相互作用可以锁住β-TPA供体上的分子内叔丁基苯单元和萘，高度限制它们在结晶态下的旋转。同时，在晶体和共轭骨架中没有观察到明显的π-π堆积接触，这降低了浓度淬灭效应（ACQ）。根据DET机制，T-β-
IQD晶体的邻腈核之间的远距离（8.50Å
）有望抑制延迟荧光（DF）和三态激射灭（图2）。此外，在TIQD晶体中，相邻的IQD段之间形成了距离为3.35Å的强分子间π-π相互作用，表明相对于T-β-IQD晶体，分子间的堆积更为紧密，且具有严重的非辐射衰变。分子动力学（MD）模拟表明，T-β-IQD的受体面与二聚体对齐方向的夹角（θ）为27.5°，T-β-IQD在非晶态下倾向于以J-聚集体形式堆积。T-β-
IQD的吡咯核间距为4.1Å。T-β-IQD的平面受体之间距离较大，避免了浓度猝灭效应。T-β-IQ

D分子的平面受体片段呈现角度错位排列，未观察到明显的共面堆叠，这将有助于抑制非掺杂薄膜中的ACQ效应。

在稀释THF溶液中，T-β-IQD几乎不发射，而当水分数（fw）增加到60%时，PL强度迅速增加，表现出明显的聚集诱导发光（AIE）特征（图2）。T-β-IQD在固体状态下表现出几乎与浓度无关的特性。这种独特的优点可以归结于它的RIR原理的AIE效应、具有C-H···π和CN···H-C分子间相互作用的J聚集性质以及晶体态的大中心到中心距离，这提高了非掺杂薄膜和基于材料的发射效率。

相关研究成果以*Highly Efficient Near-Infrared Thermally Activated Delayed Fluorescent Emitters in Non-Doped Electroluminescent Devices*
为题，作为热点文章发表在《德国应用化学》上。研究工作得到国家杰出青年科学基金、国家重点研发计划、国家自然科学基金、宁波市科技创新2025重大专项等的支持。

论文链接

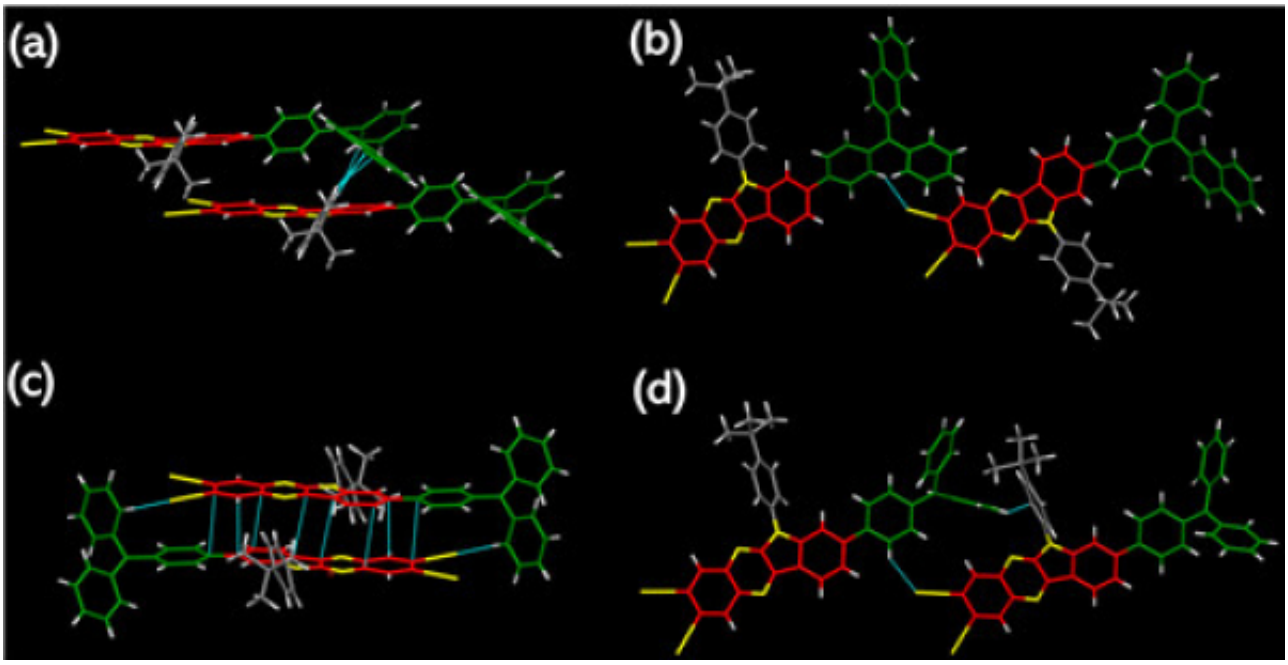


图1.分子内-分子间弱相互作用

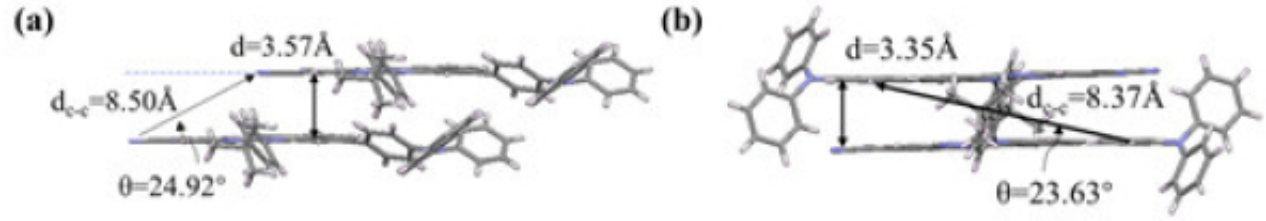


图2.晶体中大的分子间距离降低非辐射衰减速率

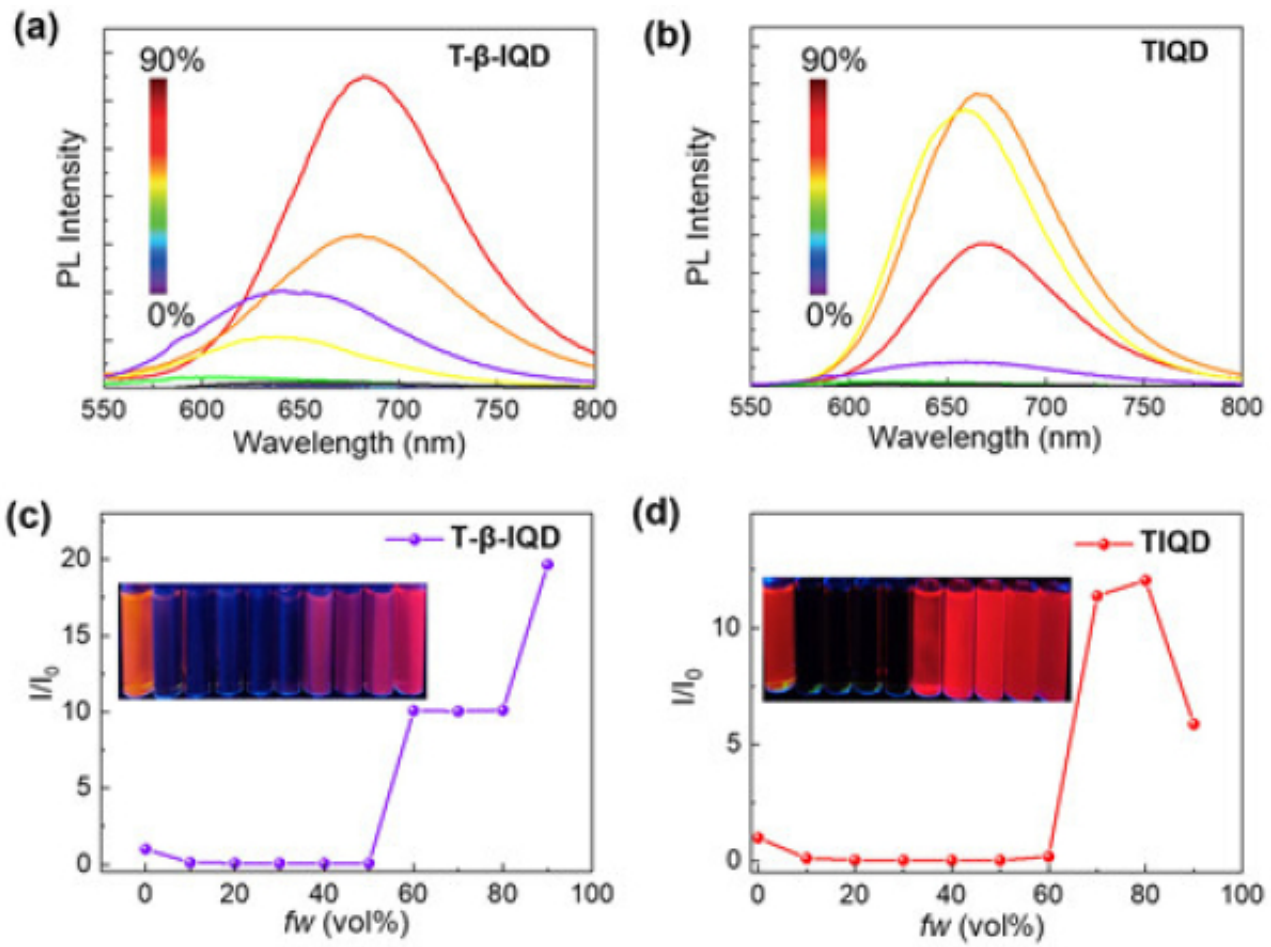


图3.分子的AIE效应特征

研究团队单位：宁波材料技术与工程研究所

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