

文章编号: 1000-7032(XXXX)XX-0001-04

分子拓扑结构导向的超窄光谱多重共振发光材料

张 翰², 王志明^{1*}, 唐本忠^{2,3*}

(1. 华南理工大学 材料科学与工程学院, 广东 广州 510640;

2. 香港科技大学 化学系, 中国 香港 999077;

3. 香港中文大学(深圳) 理工学院, 广东 深圳 518172)

摘要: 多重共振(MR)发光材料因其窄光谱发射特性,被认为是下一代超高清显示中极具前景的候选体系。然而,如何进一步窄化发射光谱以提升色纯度,仍是该领域面临的关键挑战。同时,其分子设计主要依赖经验驱动,缺乏能够有效预测发光峰宽的理论工具,制约了超窄光谱材料的快速发展。深圳大学杨楚罗团队近期提出了一种分子拓扑结构导向的高通量筛选策略,通过建立分子结构、激发态结构弛豫与发光带宽之间的内在关联,构建了可预测的超窄光谱多重共振发光材料设计框架。基于该框架,该团队成功设计并合成了光致发光半峰宽仅为9.1 nm的高阶硼氮发光材料,并在溶液加工 OLED 器件中实现了38.1%的外量子效率。该研究为超窄光谱有机发光材料的理性设计与快速发现提供了新的思路与理论工具。

关 键 词: 高通量筛选; 多重共振发光材料; 超窄光谱发射; 有机电致发光器件; 溶液加工

中图分类号: O482.31

文献标识码: A

DOI: 10.37188/CJL.20260238

CSTR: 32170.14.CJL.20260238

Molecular-Topology-Guided Ultranarrowband Multiple-Resonance Emitters

ZHANG Han², WANG Zhiming^{1*}, TANG Ben Zhong^{2,3*}

(1. School of Materials Science and Engineering, South China University of Technology, Guangzhou 510640, China;

2. Department of Chemistry, The Hong Kong University of Science and Technology, Hong Kong 999077, China;

3. School of Science and Engineering, The Chinese University of Hong Kong, Shenzhen 518172, China)

* Corresponding Authors, E-mail: wangzhiming@scut.edu.cn; tangbenz@cuhk.edu.cn

Abstract: Multiple-resonance (MR) emitters are considered promising candidates for next-generation ultrahigh-definition displays due to their narrowband emissive characteristics. However, achieving further spectral narrowing to improve color purity remains a key challenge in this field. Meanwhile, their molecular design remains largely empirical, lacking reliable theoretical tools for predicting emission bandwidths, which has hindered the rapid development of ultranarrowband emitters. Recently, Yang et al. proposed a molecular - topology - guided high-throughput screening strategy. By establishing intrinsic correlations among molecular structure, excited-state structural relaxation, and emission bandwidth, they developed a predictive design framework for ultranarrowband MR emitters. Guided by this framework, they successfully designed and synthesized high-order boron - nitrogen emitters with a small spectral full width at half maximum of only 9.1 nm, and achieved an external quantum efficiency of 38.1% in solution-processed OLEDs. This work provides a new approach for the rational design and rapid discovery of ultranarrowband organic emitters.

收稿日期: XXXX-XX-XX; 修订日期: XXXX-XX-XX

基金项目: 国家自然科学基金(52473173, U25A20569); 广东省自然科学基金(2022B1515020084); 广东省基础与应用基础研究基金(2023B1515040003); 香港创新科技署(ITC-CNERC14SC01)资助项目
Supported by National Natural Science Foundation of China (52473173, U25A20569), Natural Science Foundation of Guangdong Province (2022B1515020084), Guangdong Basic and Applied Basic Research Foundation (2023B1515040003), and the Innovation and Technology Commission of Hong Kong(ITC-CNERC14SC01)

Keywords: high-throughput screening; multiple-resonance emitter; ultranarrowband emission; organic light-emitting diodes; solution-processed

多重共振 (Multiple-Resonance, MR) 发光材料通过在刚性 π 共轭骨架中交替分布电子受体型和电子给体型原子对, 从而抑制电子-振动耦合和交换能, 进而实现窄带发射和高效三重态激子利用, 成为下一代超高清有机电致发光 (OLED) 显示技术的重要候选材料体系, 近年来受到学术界和产业界的广泛关注^[1-3]。当前, MR 发光材料在发光颜色调控和器件性能优化方面已取得显著进展^[4-5]。然而, 探索光谱半峰宽的理论极限, 仍是该领域亟待突破的重要科学问题^[6-8]。其核心挑战在于, 决定光谱进一步窄化的分子结构因素尚未明确; 与此同时, 由于缺乏能够预测发光峰宽的有效理论工具, MR 发光材料的开发仍主要依赖“设计—合成—测试”的经验试错模式, 一定程度上制约

了超窄光谱有机发光材料的快速发展。

针对这一挑战, 近期深圳大学杨楚罗、曹啸松研究团队联合武汉大学钟成副教授在 *National Science Review* 期刊上发表了突破性研究成果^[9]。该工作提出了一种分子拓扑结构导向的计算筛选策略, 对以经典 MR 发光骨架 DABNA 为基本单元构建的 635 种候选分子开展高通量筛选, 系统揭示了分子拓扑与激发态结构弛豫及发光光谱半峰宽之间的内在关联, 并据此建立了一类超窄光谱 MR 发光材料的设计框架 (图 1(a))。在此基础上, 团队进一步提出了基于基态电子结构的简化描述符 S2, 无需复杂的激发态计算即可预测谱带变化趋势, 为超窄光谱 MR 发光材料的高通量筛选和预测性设计提供了新的理论工具。

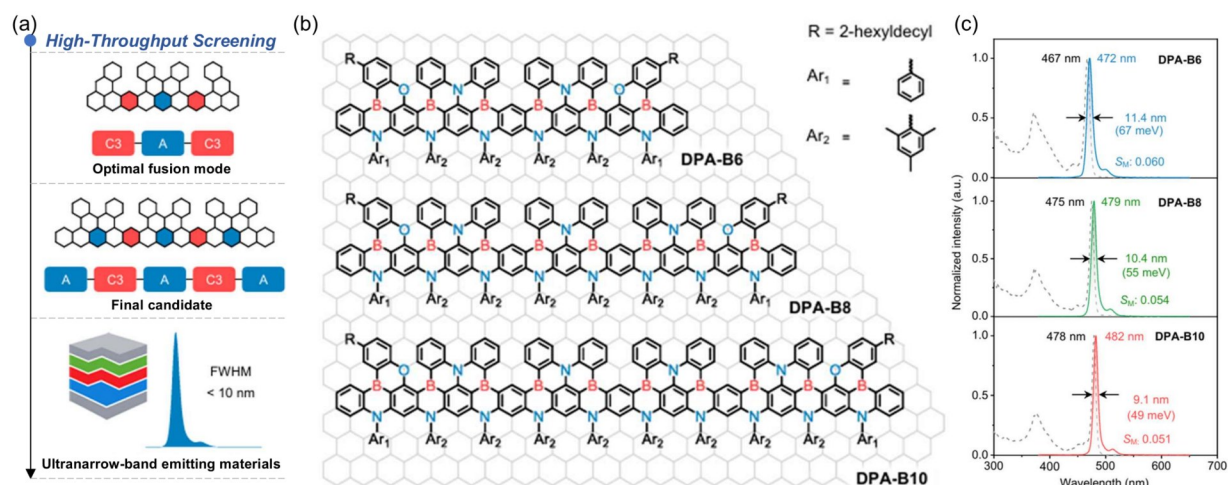


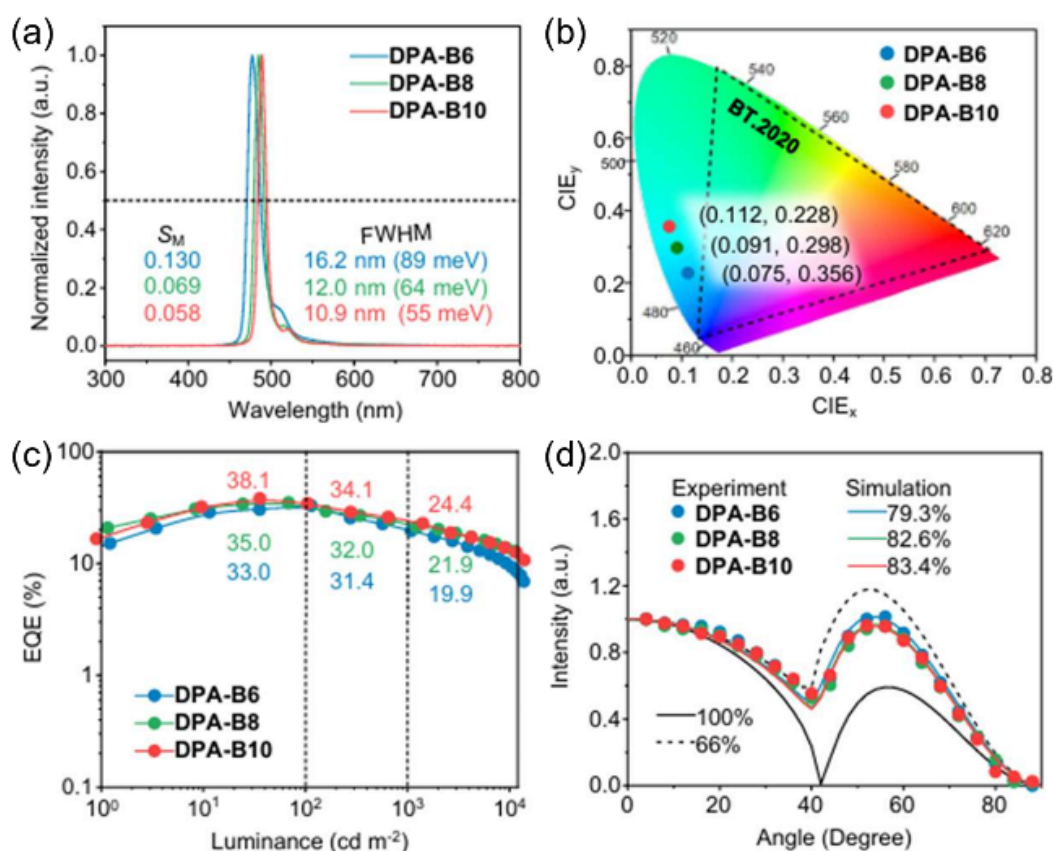
图 1 拓扑结构导向的超窄光谱多重共振发光材料的高通量筛选及候选分子的化学结构、光物理性质验证^[9]。

Fig. 1 Topology-guided high-throughput screening of ultranarrowband multiple-resonance emitters, the chemical structures of selected candidate molecules, and experimental validation of their photophysical properties^[9].

基于明确的拓扑结构调控规律, 研究团队以线性重复排列的 C3-A 结构为基础, 设计并合成了更高阶硼氮 MR 发光材料 DPA-B6、DPA-B8 和 DPA-B10 (图 1(b))。线性骨架扩展和交替耦合拓扑能够增强分子刚性, 逐步抑制激发态结构弛豫, 使该系列材料在天蓝光区域表现出逐渐窄化的光谱半峰宽 (图 1(c))。其中, DPA-B10 在甲苯溶液中的发射峰位于 482 nm, 半峰宽窄化至 9.1 nm, 且肩峰强度极低, 是迄今报道最窄光谱的有机发光材料之一。

激发态动力学研究表明, 重复 C3-A 连接结构还促进了三重态向单重态的反向系间窜越 (RISC) 过程: 一方面, 增强激子在 π 共轭体系中

的离域程度削弱了电子交换作用, 从而减小单重态 - 三重态能隙差 (ΔE_{ST}); 另一方面, 螺烯片段的累积增强了分子的面外跃迁特性, 进而增强自旋 - 轨道耦合 (SOC)。二者的协同作用使该系列材料表现出亚微秒级延迟荧光寿命, 显著短于大多数热激活延迟荧光 (TADF) 材料。相应的 RISC 速率常数达到 $0.98 \sim 1.63 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$, 是目前所有不含重原子的 TADF 材料体系中最大的之一。此外, 这些材料的荧光量子产率均接近 100%, 辐射速率常数也维持在 10^8 s^{-1} 数量级。这种快速激子动力学特征能够减少自旋翻转循环所导致的能量耗散, 有利于提升 OLED 的器件性能表现。

图2 溶液加工 OLED 的器件性能表现^[9]。Fig. 2 Device performance of solution-processed OLEDs^[9].

研究团队通过引入7-十五烷基侧链提高分子溶解性,成功将该系列发光材料用于构筑溶液加工 OLED 器件。通过优化发光层组成与器件结构,同步实现了超窄光谱特性和优异的器件效率(图2)。其中,基于DPA-B10的器件发射峰位于489 nm,电致发光半峰宽仅为10.9 nm,处于目前已报道的采用溶液法和真空蒸镀法制备的底发射 OLED 器件中最窄之列,且显著低于 microLED 和量子点 LED 平台的典型光谱半峰宽。器件所呈现的高色纯度天青色也对未来广色域显示技术体系具有重要价值。

在电致发光性能方面,DPA-B10器件的最大外量子效率高达38.1%,代表了目前溶液加工窄光谱 OLED 器件的最佳水平之一。这一优异性能不仅源于平衡的电荷复合和接近100%的荧光量子产率,还得益于其优异的分子水平偶极取向。值得一提的是,高达83.4%的水平偶极取向比例在溶液法薄膜中十分少见,为下一代可打印 OLED 显示材料的设计提供了新的思路。此外,快速的激子动力学过程有效抑制了器件在实际工作条件下的效率滚降,使器件外量子效率在100 cd m⁻²和

1000 cd m⁻²的亮度下仍分别保持在34.1%和24.4%。这些结果表明,DPA-Bn体系是一类极具潜力且易于规模化应用的超窄光谱材料体系。

综上所述,该项工作构建了涵盖分子设计、高通量计算筛选与实验验证的闭环研究体系,揭示了分子拓扑结构调控对激发态弛豫与光谱窄化的关键影响,并提出了一种适用于窄光谱材料快速筛选与可预测设计的基态电子结构描述符。在该设计框架的指导下,成功开发了光谱半峰宽仅为9.1 nm的高阶硼氮发光材料,突破了长期以来窄光谱发光材料半峰宽难以低于10 nm的瓶颈。将其应用于溶液加工 OLED 器件中,在保持超窄电致发光半峰宽(10.9 nm)的同时,实现了创纪录的器件效率(38.1%)。这一成果为超窄光谱有机发光材料的分子设计与快速发现提供了新思路,有望推动面向超高清显示的印刷 OLED 材料的开发与应用。

本文专家审稿意见及作者回复内容下载地址:
http://cjl.lightpublishing.cn/thesisDetails#10.37188/CJL.2024****

参 考 文 献:

- [1] HATAKEYAMA T, SHIREN K, NAKAJIMA K, *et al.* Ultrapure blue thermally activated delayed fluorescence molecules: Efficient HOMO-LUMO separation by the multiple resonance effect [J]. *Adv. Mater.*, 2016, 28(14):2777-2781.
- [2] KONDO Y, YOSHIURA K, KITERA S, *et al.* Narrowband deep-blue organic light-emitting diode featuring an organoboron-based Emitter [J]. *Nat. Photonics*, 2019, 13(10):678-682.
- [3] HUA T, CAO X, MIAO J, *et al.* Deep-blue organic light-emitting diodes for ultrahigh-definition displays[J]. *Nat. Photonics*, 2024, 18(11):1161-1169.
- [4] MAMADA M, HAYAKAWA M, OCHI J, *et al.* Organoboron-based multiple-resonance emitters: synthesis, structure-property correlations, and prospects[J]. *Chem. Soc. Rev.*, 2024, 53(3):1624-1692.
- [5] WU X, NI S, WANG C H, *et al.* Comprehensive review on the structural diversity and versatility of multi-resonance fluorescence emitters: advance, challenges, and prospects toward OLEDs[J]. *Chem. Rev.*, 2025, 125(14):6685-6752.
- [6] ZHOU J, WANG Q, DAI H, *et al.* Twisted hybrid-quadruple-borylated MR-TADF emitter bridged by B—N—B bond with sub-10 nm full-width at half-maximum and fast reverse intersystem crossing[J]. *Adv. Mater.*, 2026, 38(37):e73518.
- [7] MAMADA M, KATAOKA K, OCHI J, *et al.* Organic spontaneous emission approaching the monochromatic limit[J]. *Science*, 2026, 392(6803):1148-1153.
- [8] DU C, WANG Q, CHEN X, *et al.* Ultimate narrowband organic emitters with 0-0-dominated transition[J]. *ChemRxiv*, 2026, <https://doi.org/10.26434/chemrxiv.15003383/v1>.
- [9] HUA T, LI N, CAO X, *et al.* Molecular-topology-guided multiple-resonance emitters with sub-10-nm bandwidths: ultra-narrow high-efficiency solution-processable OLEDs [J]. *Nat. Sci. Rev.*, 2026: nwag377, <https://doi.org/10.1093/nsr/nwag377>



张翰(1994—),男,湖北红安人,博士,博士后,2021年于华南理工大学获得博士学位,主要从事有机发光材料的设计及电致发光器件应用的研究。
E-mail: cheungham@ust.hk



唐本忠(1957—),男,湖北潜江人,博士,教授,中国科学院院士,1988年于日本京都大学获得博士学位,主要从事高分子化学和先进功能材料的研究。
E-mail: tangbenz@cuhk.cuhk.edu.cn



王志明(1983—),男,吉林松原人,博士,研究员,博士生导师,2011年于吉林大学获得博士学位,主要从事芳基杂环高效率深蓝光材料的设计及新型AIE荧光探针的研究。
E-mail: wangzhiming@scut.edu.cn