中国科学: 化学 2026 年 第 56 卷 第 5 期: 1345 ~ 1347
SCIENTIA SINICA Chimica chemcn.scichina.com
《中国科学》杂志社 SCIENCE CHINA PRESS

亮点介绍

空间封装方法构筑高效率、高亮度与窄谱带特征的深蓝光有机发光二极管

叶华[1], 李伟[2*], 葛子义[2*]

1. 丽水学院工学院, 丽水 323000
2. 中国科学院宁波材料技术与工程研究所, 浙江省能源光电子材料与器件工程研究中心, 宁波 315201
*通讯作者, E-mail: liwei1987@nimte.ac.cn; geziyi@nimte.ac.cn

收稿日期: 2026-03-18; 接受日期: 2026-03-31; 网络版发表日期: 2026-04-14

超高清显示技术已成为下一代显示技术发展的核心方向, 其中有机发光二极管(OLED)凭借其自发光、高对比度及广色域等优势, 已经广泛应用于智能手机、便携式设备[1~3]. 随着溶液加工和喷墨打印等低成本、大面积制备技术的日趋成熟, OLED显示技术正加速向大尺寸应用领域拓展, 在商用显示、高端电视及公共信息显示屏等场景展现出显著产业化潜力. 实现高分辨率OLED显示的关键在于开发兼具高色纯度与高电致发光效率的窄谱带发射材料. 然而, 目前主流有机π共轭发光体普遍存在光谱半峰宽(FWHM)较大(通常>70 nm)的问题, 导致其原始电致发光光谱色纯度不足. 为满足显示应用对三原色色坐标的要求, 往往需依赖光学彩色滤光片或微腔谐振结构进行光谱调控, 但这会引入额外的光子损耗, 从而降低器件外量子效率(EQE)和整体能量利用效率[4,5]. 近年来, 基于富电子氮原子与缺电子硼原子(或羰基)的多重共振(MR)效应, 被认为是实现窄谱带发射的有效分子设计策略[6,7]. 该策略通过在刚性多环芳烃骨架中精准调控杂原子的空间排布, 促使最高占据分子轨道(HOMO)和最低未占据分子轨道(LUMO)分别高度局域于给电子中心(氮、氧、硫)与受电子中心(硼、羰基或者硫砜)及其相应碳原子上. 这种空间分离显著减小最低单线态(S_1)与最低三线态(T_1)激发态之间的能隙(ΔE_{ST}), 从而为高效热活化延迟荧光(TADF)提供了关键的电子结构基础[8,9]. 此类兼具多重共振特征与TADF机制的发光材料, 统称为MR-TADF材料, 已成为高性能OLED发光材料的重要研究方向. 然而, 早期平面型分子虽结构简洁, 但其高度共面构型导致固态中发生紧密π-π堆积, 进而引发聚集诱导猝灭(ACQ)、激发态缔合物(excimer)形成及分子间电荷转移(intermolecular charge transfer)等问题. 这些效应会导致发射光谱红移和展宽, 从而严重降低器件的色纯度与效率[10~13]. 因此, 如何在保持MR所需电子结构刚性的同时抑制固态聚集, 已成为MR-TADF材料后续研究的焦点.

近期, 深圳大学黄忠衍团队[14]通过在DABNA-Me核心的外围引入刚性且体积庞大的1,1,4,4-四甲基-1,2,3,4-四氢萘(TMNa)基团, 并在其邻位进一步连接二叔丁基苯基(D*t*BuP)基团, 从而成功构建了两种新的MR-TADF发光材料: **DnaBN** (半封装, 图1)和**QNa-BN** (全封装, 图1). 该系列材料在10 wt%的高掺杂浓度下, 实现了34.4%的外量子效率, 同时获得半峰宽仅为22 nm的深蓝光(发射峰为458 nm) OLED, 突显了这种空间屏蔽策略在高性能深蓝色OLED中的巨大潜力.

引用格式: Ye H, Li W, Ge Z. Spatial encapsulation constructs deep blue TADF-based organic light-emitting diodes with high efficiency, high brightness, and narrowband characteristics. *Sci Sin Chim*, 2026, 56: 1345–1347, doi: 10.1360/SSC-2026-0065

© 2026 《中国科学》杂志社

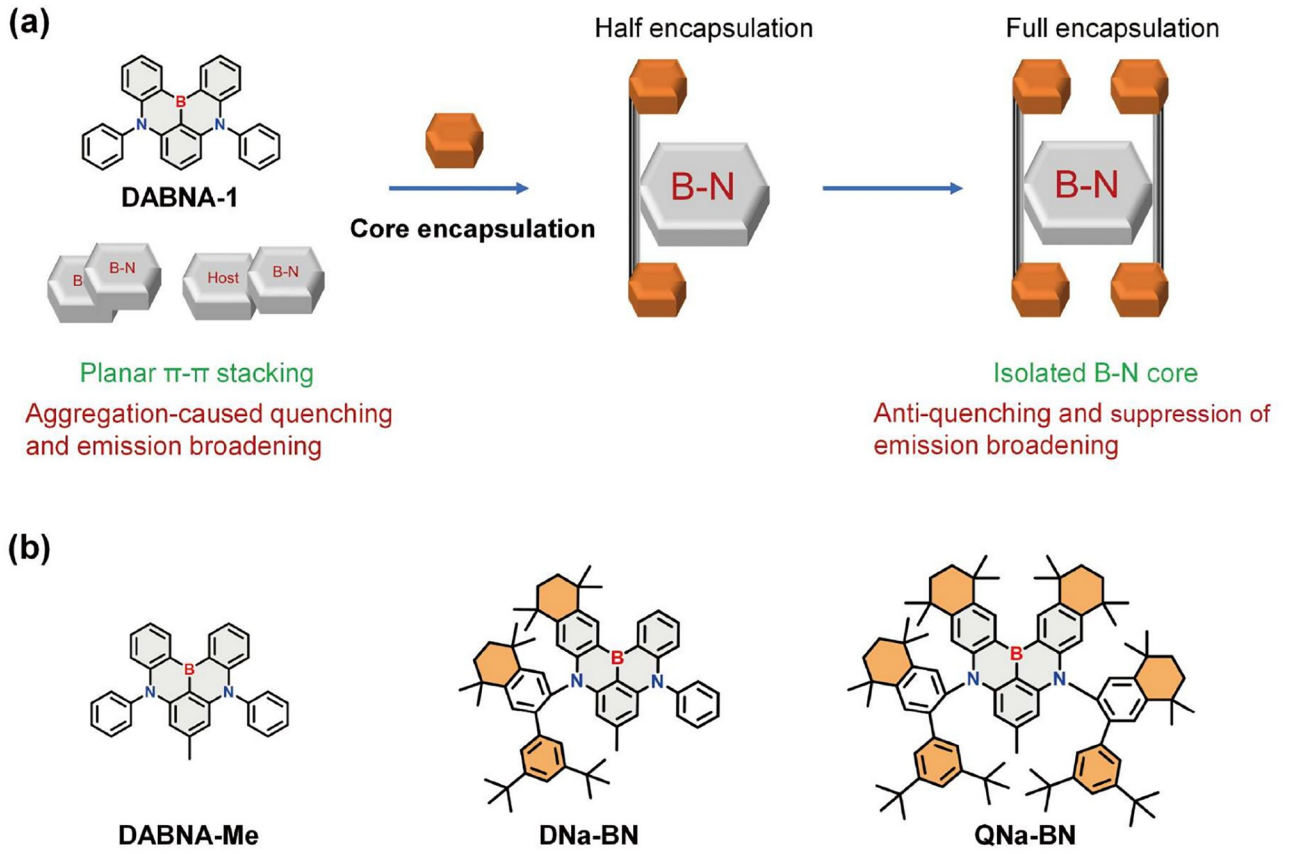


图 1 (网络版彩图) (a) **DABNA-Me**、**DNa-BN**和**QNa-BN**的分子设计概念和(b) 化学结构[14]
Figure 1 (Color online) (a) The molecular design concept and (b) chemical structures of **DABNA-Me**, **DNa-BN**, and **QNa-BN** [14].

相关成果为深蓝光OLED材料的开发提供了新的思路, 并作为封面文章发表在*Science China Materials*上.

该研究基于空间封装的分子设计策略, 在经典DABNA-Me的MR核外围精准引入刚性、大体积且非共轭的TMNa基团(图1b): 其既可与MR骨架稠合, 亦可作为刚性发色取代基键合于氮原子. 进一步地, 在TMNa单元邻位引入二叔丁基苯基(D*t*BuP)基团, 通过协同空间位阻效应诱导分子整体呈现可控扭曲构象. 单晶X射线衍射证明, 这种立体屏蔽设计能显著增大分子间距离, 特别是**QNa-BN**分子, 其核心平面的间距可达约7.99 Å, 几乎完全阻断了分子间有害的π-π相互作用. 理论计算同时证实, 这些庞大的外围基团在提供空间位阻的同时, 基本不干扰MR核心本征的电子结构和前线轨道分布, 因此保留了材料优异的窄谱带发光特性. 尤为关键的是, 该空间封装结构赋予材料在聚集态下具有对掺杂不敏感的光物理行为, 其中, 全屏蔽的分子**QNa-BN**表现尤为突出. 在高掺杂浓度下, 其掺杂薄膜仍能保持超过96%的高光致发光量子产率, 并且发射光谱的半峰宽仅为22 nm左右, 与在稀溶液中的结果几乎一致, 显示出极佳的抗聚集和抗光谱展宽能力. 基于**QNa-BN**制备的非敏化OLED器件实现了458 nm的深蓝光发射, 色坐标为(0.142, 0.085), 接近NTSC蓝光标准, 最大外量子效率达到34.4%, 最大亮度超过20,000 cd m^{-2}. 此外, 通过构建超荧光器件并引入TADF敏化层, EQE_{max}进一步提升至38.7%, 同时显著抑制了效率滚降.

该工作通过巧妙的分子设计策略, 成功构建了对MR-TADF发光核心的空间封装结构, 在完整保留其窄谱带发射、小ΔE_{ST}及高辐射速率等本征光电特性的同时, 有效抑制了固态薄膜中的分子聚集. 该设计为同步实现高外量子效率、高亮度与高色纯度的深蓝OLED器件, 提供了新的分子设计思路.

参考文献

1 Zhang D, Huang T, Duan L. *Adv Mater*, 2020, 32: e1902391
2 Yang Y, Guo X, Zhu M, Sun Z, Zhang Z, He T, Lee C. *Adv Energy Mater*, 2023, 13: 2203040
3 Ding Y, Jiang J, Wu Y, Zhang Y, Zhou J, Zhang Y, Huang Q, Zheng Z. *Chem Rev*, 2024, 124: 1535–1648
4 Liu J, Yin X, Huang M, Miao J, Li N, Huang Z, Yang C. *Adv Mater*, 2025, 37: e2411610
5 Liu J, Zhu Y, Tsuboi T, Deng C, Lou W, Wang D, Liu T, Zhang Q. *Nat Commun*, 2022, 13: 4876
6 Hatakeyama T, Shiren K, Nakajima K, Nomura S, Nakatsuka S, Kinoshita K, Ni J, Ono Y, Ikuta T. *Adv Mater*, 2016, 28: 2777–2781
7 Kondo Y, Yoshiura K, Kitera S, Nishi H, Oda S, Gotoh H, Sasada Y, Yanai M, Hatakeyama T. *Nat Photonics*, 2019, 13: 678–682
8 Wu X, Ni S, Wang CH, Zhu W, Chou PT. *Chem Rev*, 2025, 125: 6685–6752
9 Mamada M, Hayakawa M, Ochi J, Hatakeyama T. *Chem Soc Rev*, 2024, 53: 1624–1692
10 Wu L, Liu C, Liu D, Li D, Li W, Zhang J, Mu X, Xin Z, Liu B, Qi H, Wang Z, Liu D, Su SJ, Zhou Y, Wu S, Ge Z. *Angew Chem Int Ed*, 2025, 64: e202504723
11 Wu L, Mu X, Liu D, Li W, Li D, Zhang J, Liu C, Feng T, Wu Y, Li J, Su SJ, Ge Z. *Angew Chem Int Ed*, 2024, 63: e202409580
12 Zhang J, Liu H, Wu L, Fang K, Li D, Liu D, Nie X, Xu L, Zhao Z, Li W, Ge Z. *Sci Bull*, 2026, 71: 1073–1083
13 Mubarok H, Amin A, Lee T, Jung J, Lee JH, Lee MH. *Angew Chem Int Ed*, 2023, 62: e202306879
14 Ming R, Li N, Chen Z, Xue Z, Miao J, Huang Z. *Sci China Mater*, 2026, 59: 2031–2039