

# 2024 年度江西省自然科学奖提名项目公示

**项目名称:** 高性能铜配合物发光材料的分子设计及构效探索

**提名单位:** 江西科技师范大学

**拟提名等级:** 一等奖

**提名意见:**

本项目首次实现了高能级发色基团的  $^3(\pi-\pi^*)$  态与  $^3\text{MLCT}$  能级平衡, 为高吸收、长寿命的新型铜配合物的分子设计提供了新思路; 提出了以廉价铜粉来制备新型四配位卡宾铜配合物的合成方法和手段, 改变了目前主要通过贵金属 Ag 盐的转移金属化来制备、原料昂贵且反应条件苛刻的状况; 首次以吡啶-咪唑卡宾为功能配体, 制备出光致发光效率近 100% 的四配位卡宾铜配合物并揭示了其高效发光机制。

该项目依托 2 项国家自然科学基金和省级基金, 5 篇代表性 SCI 论文总他引 57 次。该研究成果丰富了光电材料科学等学科的基础理论, 对推动化学、物理、材料等相关学科的交叉发展也具有重要的意义。鉴于该成果的理论价值和学术界公认度, 特此提名该项目为江西省自然科学奖一等奖。

**项目简介:**

本项目成果属于物理化学、有机化学和无机化学交叉学科领域。

高性能有机发光材料是 OLED 器件的重要组成部分, 已经成为世界科技研究的前沿热点。项目以探索构筑高性能铜配合物发光材料为研究目标, 通过一系列有机配体的分子结构设计, 合成了一系列新型铜配合物发光材料, 实现了对铜配合物发光材料性能的有效提高, 阐明了其结构与性能之间的构效关系, 提出了一些新的观点和机理, 为高性能发光铜配合物的设计合成及其应用提供了理论指导。主要研究内容和成果如下:

1、创新性地提出以有机芴分子的配体三重态  $^3(\pi-\pi^*)$  态作为“能量储存池”与母体铜配合物的  $^3\text{MLCT}$  态形成能级平衡匹配, 为实现强吸收、长寿命的铜配合物发光材料提供了新的构筑方案, 引起了国际学术界的关注。

2、发展了制备新型四配位卡宾铜配合物发光材料的新方法, 以双齿吡啶-咪唑卡宾为功能配体, 以廉价的铜粉为反应原料, 首次成功地制备出四配位卡宾铜配合物发光材料。该合成方法不需要用价格昂贵的银盐做金属转移剂, 反应条件温和、可控, 可以采用不同结构的二齿卡宾配体和辅助配体来构筑结构可控的

新型四配位卡宾铜配合物并实现其发光性能的调控,丰富了铜配合物发光材料的种类及合成方法。

3、首次以吡啶-咪唑卡宾为功能配体,制备出高性能发光四配位卡宾铜配合物,光致发光效率近 100%,揭示了其高效发光机制,为开发新型发光材料提供了一条新途径。

本项目获得国家自然科学基金、江西省自然科学基金的资助。项目成果不仅为高性能铜配合物发光材料的制备提供了新方法和理论依据,对于丰富原子簇配位化学、分子磁学、光电材料科学等学科内容,促进化学、物理、材料等学科的交叉发展具有重要的意义。

代表性论文专著目录:

序号	论文题目	论文全部作者	是否在江西境内完成
1	Prolonging the Emissive Lifetimes of Copper(I) Complexes with (MLCT)-M-3 and (3)(-*) State Equilibria - A Fluorene Moiety as an Energy Reservoir	易成, 许胜先, 王静岚, 赵丰*, 夏红英, 王一波	是
2	Schiff base-type copper(I) complexes exhibiting high molar extinction coefficients: Synthesis, characterization and DFT studies	吕洁, 陆银夫, 王静岚, 赵丰*, 王一波, 何海峰*, 吴亚芊*	是
3	Four-coordinate N-heterocyclic carbene (NHC) copper(I) complexes with brightly luminescence properties	刘绍波, 许胜先, 王静岚, 赵丰*, 夏红英*, 王一波	是
4	Four-coordinated copper(I) complexes containing variably substituted N-heterocyclic carbenes (NHCs): Synthesis, photophysical properties and theoretical investigation	王静岚, 刘绍波, 许胜先, 赵丰*, 夏红英*, 王一波	是
5	Highly effective luminescence stemmed from thermally activated delayed fluorescence (TADF) and phosphorescence for the new four-coordinate copper(I) complexes containing N-heterocyclic carbene (NHC) ligands	王静岚, 陈红云, 许胜先, 苏青知, 赵丰*, 夏红英, 王一波	是

主要完成人情况:

排名	姓名	职务	职称	工作单位	对本项目的贡献

1	赵丰	无	教授	江西科技师范大学	代表作 1、2、3、4、5 的通讯作者
2	吴亚芊	副院长	讲师	江西科技大学	代表作 2 的通讯作者
3	何海峰	无	副教授	江西科技师范大学	代表作 2 的通讯作者
4	陈红云	无	教授	江西科技师范大学	代表作 5 的合作完成人
5	许胜先	无	教授	江西科技师范大学	代表作 1、3、4、5 的合作完成人