

- ing on behaviour of REE, U, Th and PGE in igneous Processes. *J of Petrology*, 2001, 42: 1887
- 39 Torok K, et al. Fluid inclusion in niquelandia and Borro Alto complex, Goiás State, Brazil. *Mineralogy & Petrology*, 2002, 96: 75
- 40 Davison I, et al. Laminar flow in shear zones: The Pernambuco Shear Zone, NE Brazil. *J Struct Geol*, 1995, 17: 149
- 41 Conti A, et al. The relationship between evolution of fluid chemistry and the style of brittle deformation: Examples from the northern Apennines (Italy). *Tectonophysics*, 2001, 330: 103
- 42 Rumble D. Qinglongshan oxygen and hydrogen isotop anomaly near Donghai in Jiangsu Province, China. *Geochim Cosmochim Acta*, 1999, 62: 3307
- 43 张林, 等. 纳米  $\text{Fe} \cdot \text{In}_2\text{O}_3$  颗粒膜的磁性和巨磁性电阻效应. *科学通报*, 2002, (19): 1463
- 44 Roy L. Source geometry identification by simultaneous use of structure index and shape factor. *Geophysical Prospecting*, 2001, 49: 159

## 中比科学家在分子发光材料理论研究方面的合作取得重要进展

在国家自然科学基金委重大国际合作项目等资助下, 中国科学院化学研究所帅志刚研究员与比利时蒙斯-艾诺大学 Jean-Luc Brédas 教授和 David Beljonne 博士合作, 在分子发光显示材料效率的理论研究中取得重要进展, 其合作研究结果最近发表在国际著名刊物 *Advanced Functional Materials* (2004, 14: 684) 和 *Physical Review Letters* (2004, 93: 066803) 上。

这一合作研究结果更加明确地指出高分子的电致发光效率可以远远大于自旋统计给出的 25% 极限, 从而揭示了分子发光显示材料工业的广阔发展前景。该理论研究结果引起了国际电子工业界的广泛关注。2004 年 4 月 14 日, 大型全球性网站“电子工程时代”(EE TIMES) 以“Theory promises brighter plastic light-emitting-diodes”(理论许诺更亮的塑料发光二极管) 为题详细报道了这一重要成果。英国、法国、德国、亚洲(包括台湾地区)等国家和地区的近 10 个相关网站以及国际半导体工业界著名新闻杂志 *Solid State Technology* (2004 年 7 月) 上进行了转载、翻译和报道。相关网站评论指出, “分子发光理论的一个新进展表明电致发光效率可以大大增加, 从而大力推进目前柔性显示的研究, 并可以大大降低目前昂贵的平板显示材料的费用。新理论来自比利时蒙斯-艾诺大学、中国科学院分子科学中心(北京)和乔治亚理工学院的一个合作研究, 并与实验科学家紧密合作, ……”。

这项理论研究成果源于多年的国际合作研究。5 年前, 帅志刚研究员在比利时蒙斯-艾诺大学工作期间, 曾与 Beljonne 博士和 Brédas 教授以及美国麻省理工学院的 Silbey 教授合作, 从电子关联效应出发指出高分子的电致发光内量子效率可以超过 25% 的极限, 从而引起了国际学术界的广泛关注。几年来国际上许多实验室一直在设计实验探测其微观机理, 但这些实验结果存在许多分歧。尽管有几家实验室测量结果表明, 单线态与三线态的比例可以高于 1:3, 但美国普林斯顿大学的 Forrest 教授和麻省理工学院的 Baldo 教授的实验表明, 无论是小分子还是高分子, 其电致发光内量子效率都小于 25%; 台湾地区学者的实验测量也表明在弱电场下, 单线态的比例小于 1:3, 因此发光效率小于 25%。

帅志刚研究员回国工作以后, 在国家自然科学基金委员会的重大国际合作研究项目资助下, 系统地研究了高分子与小分子的激子形成过程, 在电子耦合的基础上, 又用 Marcus 的电荷转移理论, 考虑了驱动力的贡献。同时, 他们与实验科学家合作, 对于理论提出的激子形成过程中的中间态做了测量, 通过热激荧光和热激磷光与温度的关系, 从而精确地测量了在第一步过程中形成的极化子对的单线与三线的交换能, 与理论计算结果完全一致。因此更加明确地指出高分子的电致发光效率可以远远大于自旋统计给出的 25% 极限。2004 年 5 月 17 日, 飞利浦公司的科学家宣布通过修饰发光器件的阳极, 增大了电子-空穴复合区域, 得到了外量子效率高达 12% 的高分子器件, 是以以前的结果的 3 倍, 换算成内量子效率为 50%—70%。这是超过 25% 极限的最直接的实验证据, 将大力推动分子显示器件的产业化, 从而揭示了塑料显示工业更加广阔的应用前景。

(供稿: 吕蓓蕾 杨俊林)