

杨杰 —— 未来三年研究计划

有机磷光闪烁体

1. 研究目标

本项目将以有机磷光闪烁体为主要研究对象，深入探究其聚集态结构与三线态稳定性及相应光学性质之间的关系，发展性能优良的闪烁体材料，并利用 X 射线的强穿透作用探索其在无损检测和深层次组织成像与肿瘤治疗等方面的潜在应用。

2. 研究背景

X 射线是指波长约介于 0.01~100 Å 之间的电磁辐射，在其激发下能产生发光现象的材料被称为闪烁体。目前，X 射线探测应用已经遍布人类活动的各个方面，近至安防安检、工业探伤和医学诊疗，远至高能物理、天文观测等诸多领域。为提高 X 射线探测器的性能，对其核心部件闪烁体的开发尤为重要。至今为止，闪烁体材料的开发主要是基于无机物、钙钛矿或稀土卤化物来进行的，而与之相对应的纯有机闪烁体却相对较少，特别是那些能被 X 射线激发的长寿命室温磷光材料。受限于固有的能级，纯有机发光材料大多仅能在紫外光或者可见光激发下产生室温磷光现象。在此过程中，基态的有机分子吸收光子跃迁到激发单线态，通过系间窜越到达激发三线态后才能产生磷光辐射。而对于有机磷光闪烁体，其在 X 射线激发下由于电子-空穴的复合能直接产生 75% 的三线态激子和 25% 的单线态激子，因此该过程常表现较强的磷光。同样地，由于能够充分利用激发态能量，有机磷光闪烁体也将比普通的荧光闪烁体更具发展潜力。进一步地，有机磷光闪烁体高的三线态激子保持率还能与周围环境中的氧气反应生成更多的单线态氧，从而促进其在 X 射线光动力治疗等方面的应用。因此，有机磷光闪烁体，即 X 射线激发的纯有机室温磷光材料研究具有重要意义。

3. 研究内容

相比于普通的光致室温磷光现象，有机磷光闪烁体在 X 射线激发下将经历更加繁复的光物理过程，因此需要更加细致的构效关系研究来实现其光物理过程及相应材料性质的精细调控。在前期的工作中，申请人发现有机化合物的聚集态结构对三线态稳定性及相应的光致室温磷光性质具有重要影响，并且可以通过分子化学结构的设计来予以调控。基于此，申请人拟对影响有机磷光闪烁体性能的聚集态结构予以“分级”剖析，通过对其化学结构、分子构象和分子聚集的精细调控来研究多级结构对磷光闪烁体性能的影响规律，发展性能优良的闪烁体材料，包括长发光寿命、高光产额或单线态氧产率等。

4. 预期成果

开发一系列高效的有机磷光闪烁体材料，厘清其中的构效关系，构建相应的理论模型，并探索其在无损检测和生物成像与治疗等方面的实际应用。预计申请发明专利 2-3 项，发表高水平论文 3-5 篇，培养研究生 3-5 名。