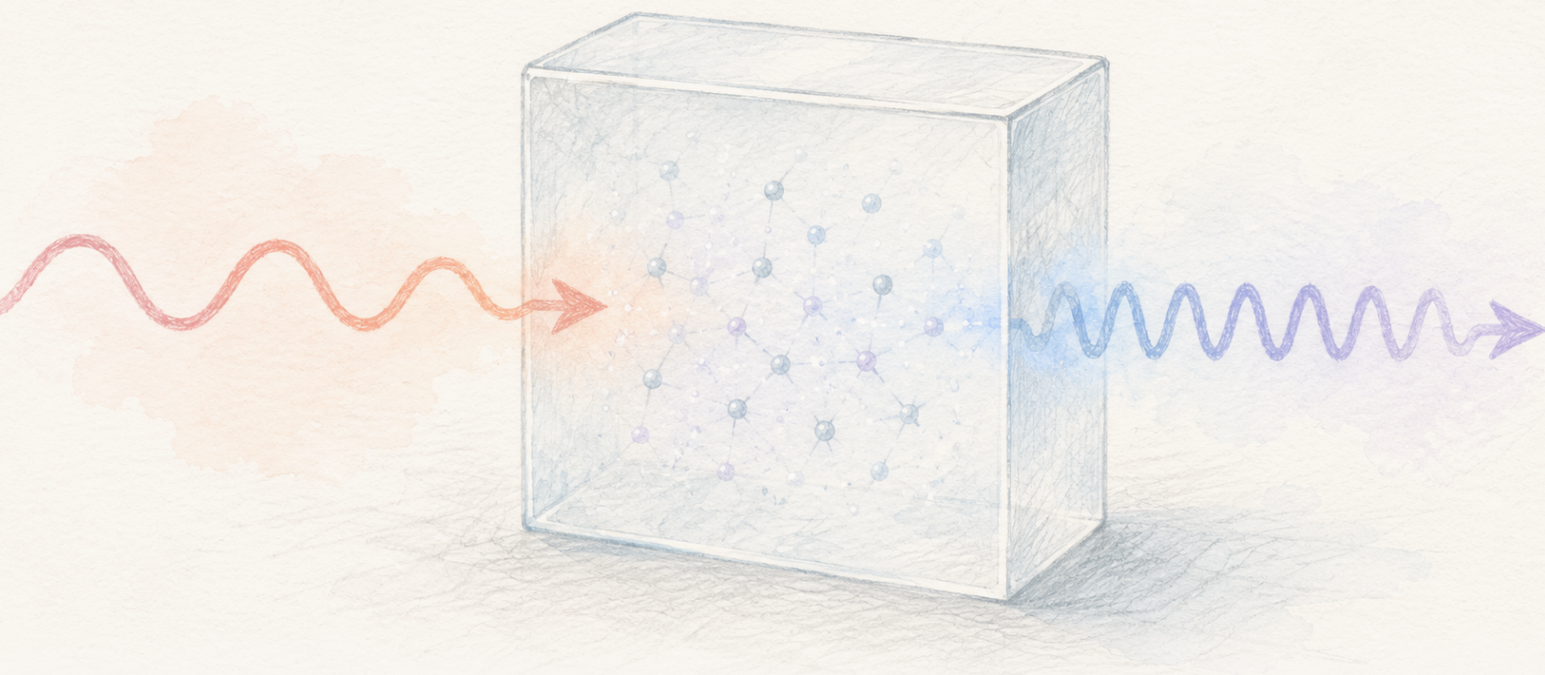




The CLEAN PAPER

WHAT THE PAPER SAYS · WHAT IT DOESN'T · WHY IT MATTERS

一种固态材料在阳光级别强度下将可见蓝光转换为紫外光——但它不是一台太阳能机器

研究人员设计了基于 *DHI* 的有机晶体，其烷基侧链在不妨碍三重态能量移动的情况下保护 π 电子系统。最佳的 *iBu-DHI/Ir(ppy)₃* 固态薄膜通过三重态-三重态湮灭实现了可见光到紫外的上转换，绝对量子产率为 1.9%，阈值激发强度为 1.2 mW cm^{-2} ，接近 445 nm 附近的太阳强度。这是固态光子上转换的一项真实材料进步。它不是个工作太阳能设备，不是「免费紫外光」，也尚未证明可见阳光能够大规模驱动有用的紫外化学。

Written by Laura Nesso · Cross-checked by Lucio Vaglio · Edited by Michele Renda · Figures by Laura Nesso and Nova Vela · AI-assisted, human-reviewed

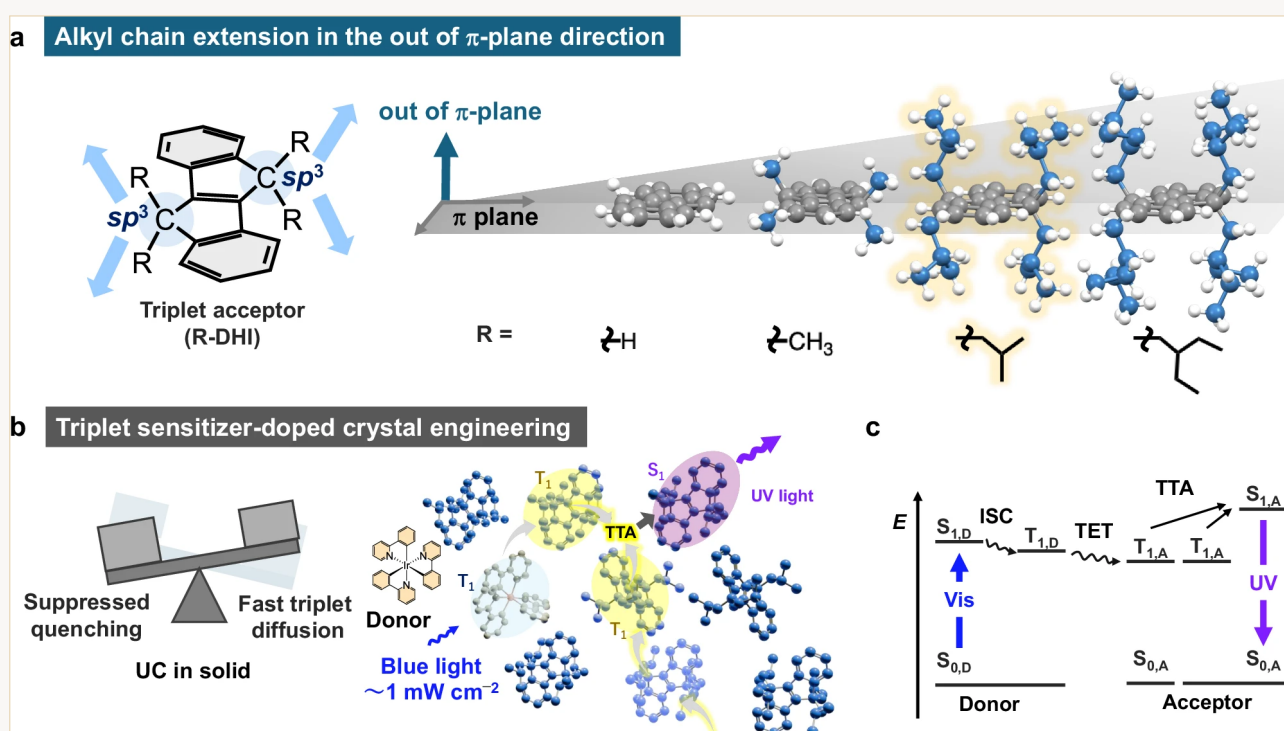
Paper: *Sterically protected π -electron systems for efficient solid-state photon upconversion*, Naoyuki Harada, Hayato Shoyama, Nutnicha Boonmong, Kiichi Mizukami, Yuya Watanabe, Pei Zhao, Masahiro Ehara, Yoichi Sasaki, and Nobuo Kimizuka, *Nature Communications* 17, 5134 (2026) · DOI: 10.1038/s41467-026-73898-0

一种达到阳光水平强度的技巧，而不是太阳能装置

到达地球的大多数阳光是可见光和红外光。紫外光只占其中很小一部分，但紫外光子具有很强的化学活性：它们能驱动低能量可见光子无法驱动的反应。这使光子上转换成为一个很有吸引力的设想。如果一种材料能够吸收两个低能量的可见光子，并释放出一个高能量的紫外光子，那么可见光就能用于通常需要紫外光的化学反应。

这篇论文研究的是这个问题中较难的一种情形：在固体中、以阳光水平的强度实现可见光到紫外光的上转换，而且不依赖溶液中自由扩散的分子。这一点很重要，因为溶液体系可能很高效，但用于器件时不太方便：溶剂会蒸发、泄漏，或限制长期使用。固体更适合实际应用，但通常会破坏上转换所需的激发态。

所以，真正的成果并不是“阳光免费变成紫外光”。它是一个针对特定矛盾的材料化学解决方案：在固体中，分子必须足够接近，三重态能量才能传递；但又不能过于接近，否则它们会彼此猝灭。



论文的设计逻辑集中在这张图中。受体分子经过烷基侧链修饰，侧链从平坦的 π 平面伸出，从而改变分子在晶体中的堆积方式。目标是制备一种固体材料，使三重态能量仍能在分子之间快速传递，同时减少猝灭造成的损失。敏化剂先吸收可见蓝光，并把三重态能量传给受体；当两个受体三重态相遇时，三重态-三重态湮灭可以产生一个能量更高的紫外光子。这总结的是分子设计、固态权衡和能量传递路径，而不是对器件性能的直接测量。

Harada et al. / Nature Communications CC BY 4.0

作者做了什么

其机制是三重态-三重态湮灭光子上转换（TTA-UC）。简单来说：

1. 一个供体分子吸收可见光，形成寿命较长的三重态激发态；
2. 该三重态能量传递给一个受体分子；
3. 两个处于激发态的受体相遇；
4. 它们的能量合并成一个能量更高的单重态；
5. 受体发射出能量更高的光子——这里是紫外光。

在液体中，分子扩散有助于第 3 步。分子会四处移动并发生碰撞。在晶体中，分子不会这样运动。能量必须通过材料的堆积结构迁移，因此堆积方式必须恰到好处。

作者使用了一系列以二氢茚并 [2,1-a] 茚 (DHI) 为基础的分子。他们的设计思路在概念上很简单：在分子的 π 电子平面上方和下方接上烷基链。这些侧链像间隔物或缓冲垫一样发挥作用。它们防止荧光 π 体系堆积得过于紧密，从而抑制猝灭，同时仍允许合适的轨道接触，使三重态能量得以传递。

他们测试了几种衍生物，并确定 **iBu-DHI**——异丁基取代的版本——实现了最佳平衡。他们将其与三重态供体 **Ir(ppy)₃** 配对，通过旋涂或滴涂制备结晶固体薄膜，并测量了荧光、三重态寿命、三重态扩散行为、上转换量子产率、耐氧性和激发强度阈值。

他们发现了什么

侧链保护了激发态。纯 DHI 在稀溶液中荧光非常好，但在晶体中很差：其荧光量子产率从溶液中的 96% 降至晶体中的 10%。而 iBu-DHI 的晶体仍能强烈发光——研磨前约为 69%，研磨后为 83%，与溶液中的数值相当。这是这个技巧的第一半：固体不再那么容易破坏单重态激发态。

最佳固体薄膜以低强度将可见光上转换为紫外光。在旋涂的 iBu-DHI/Ir(ppy)₃ 薄膜中，作者报告称，在校正自吸收后，绝对上转换量子产率为 **1.9%**；在 445 nm 处，激发强度阈值为 **1.2 mW cm⁻²**。他们将其与该波长附近的太阳辐照度进行比较：445 ± 5 nm 约为 **1.4 mW cm⁻²**。直白地说：这种材料能在普通阳光的强度范围内工作，而不只是能在极强激光下工作。

固态性能来自一种折中，而不是单纯增大空间位阻。让分子彼此离得更远可以减少猝灭，但间距过大又会减慢三重态能量迁移。体积较大的 2-EtBu-DHI 衍生物具有较长的三重态寿命，却表现出较差的上转换阈值特性。iBu-DHI 晶体似乎处在更有用的中间位置：有足够的空间位阻保护来抑制猝灭，也有足够的分子接触来实现三重态传递和三重态-三重态湮灭。

这种材料并不只是一个被固定在原地的溶液体系。论文认为，晶体堆积、均匀的供体分布和致密的分子组装都很重要。在相关薄膜中，SEM-EDX 映射没有显示出微米尺度的供体偏析；而供体的磷光猝灭则表明三重态能量传递高效。补充材料还包括晶体中分子对的重三重态能量传递和湮灭时间的理论估算。

它表现出耐氧发光。氧通常会猝灭三重态，这是 TTA-UC 的一个主要麻烦。致密的固体薄膜在空气中仍表现出上转换，但要先经历一段消耗氧气的初始启动阶段。这在实际应用上很重要，但并不等于证明器件能够长期在户外稳定运行。

这可能意味着什么

稳妥的解读是，这是一个清晰的材料设计成果。作者找到了一种调控有机 π 电子体系堆积方式的方法，使固体能够完成通常在溶液中容易得多的可见光到紫外光上转换。其进展不在于证明光子上转换存在，而在于这个特定的固态体系将几种通常彼此冲突的性质结合起来：高荧光产率、长三重态寿命、快速三重态扩散、耐氧性，以及接近太阳辐照度的工作条件。

这个分子之外还有更广泛的启示。对于固态 TTA-UC，问题不是分别问“如何保护激发态？”或“如何移动三重态能量？”。问题在于如何设计分子间距，让这两件事同时成立。iBu-DHI 的结果是这一设计原则的具体例子。

容易出现的过度解读也很明显：可见阳光变成了紫外光，因此太阳能化学问题解决了。这不是论文展示的内容。论文展示的是一种具有前景的光物理机制和具体性能数据的材料；实验是在受控薄膜中、按照明确的光学条件完成的。

这并不能证明什么

- 它**不是太阳能器件**。没有完整器件、没有户外组件、没有系统级能量平衡，也没有展示由这层薄膜供能并产生有用化学产物的系统。
- 它不是“**阳光免费变成紫外光**”。固体中的上转换量子产率为 **1.9%**，并非接近完全转换。对于这类材料而言，这个数值有意义，但大多数输入光子并不会变成紫外光子。
- 它**没有展示实际使用中的广泛耐久性**。作者在受控条件下测试了光稳定性和耐氧性，但这与器件在高温、湿气、氧气、机械应力和宽带阳光下运行数月或数年并不是一回事。
- 它依赖特定的供体-受体材料体系。最佳结果使用的是 iBu-DHI 和 Ir(ppy)₃。论文还显示，邻近的分子变体可能表现差得多，因此这不是一个“加上烷基链就能奏效”的通用配方。
- 它**没有消除所有实际问题**。Ir(ppy)₃ 含有铱；作者还在补充实验中展示了使用无金属 TADF 供体进行敏化，但固态性能的最佳代表仍是铱供体体系。
- 它**没有证明可见光到紫外光的上转换在光催化、太阳能燃料、传感或灭菌方面会具备经济或技术上的实用价值**。这些是可能的应用领域，而不是这篇论文的结果。

证据有多强？

对于核心光物理主张，证据很强：论文报告了相互一致的吸收/发射测量、荧光量子产率、三重态寿命、激发强度阈值、上转换光谱、绝对量子产率测量、晶体结构、供体分布检查、补充源数据，以及支持所提出堆积机制的理论计算。《Nature Communications》文章开放获取，补充信息和源数据文件也可获得。

主要需要注意的是范围。最有力的结论是关于实验室表征条件下的一种材料。从“在接近阳光水平的蓝光强度下实现 1.9% 可见光到紫外光上转换的固态薄膜”到“有用的太阳能技术”，中间还有很长的距离。要跨过这一步，还需要集成、稳定性、有用产出、可规模化制造，以及一个能够说明上转换紫外光子为何优于其他驱动目标化学反应方式的理由。

这里还有一个微妙的措辞问题。“阳光水平”指的是实验所用激发波长附近的强度，并不自动意味着器件能够在整个太阳光谱下高效运行。这一区别很重要。

为什么重要

光子上转换很容易被解释错：两个微弱光子进去，一个更强的光子出来。但难点不在这句口号。难点在于安排真实的分子，使能量能够储存足够长时间、移动足够远，并在以热的形式泄漏之前完成合并。

这篇论文让这个难题有了具体的材料形态。侧链并不是装饰。它们是分子架构的一部分：在 π 体系的上下进行屏蔽，抑制猝灭，同时仍为三重态能量的传递留下路径。这正是值得讲授的部分，因为它把模糊的“更好的材料”变成了读者可以想象的物理折中。

如果未来的可见光到紫外光上转换器件变得有用，它们还需要在这篇论文之外完成许多步骤。但它们同样需要这种分子层面的精准控制。这个结果不是器件突破，而是一个有力的例证，说明如何让固体完成一种通常会被固态环境破坏的光物理过程。

简明总结

研究人员设计了一系列以 DHI 为基础的有机分子，其烷基侧链从上下两侧屏蔽 π 电子平面。在最佳情况下，iBu-DHI 与三重态供体 Ir(ppy)₃ 混合形成结晶固体薄膜，通过三重态-三重态湮灭将可见蓝光转换为紫外发射。该薄膜的绝对上转换量子产率达到 **1.9%**，激发强度阈值为 **1.2 mW cm⁻²**，接近 445 nm 激发波长附近的太阳辐照度。真正的进展在于分子堆积：既有足够的间隔来抑制激发态猝灭，又有足够的接触来实现三重态能量传递和三重态扩散。这是固态可见光到紫外光子上转换的一项有力材料实证——不是太阳能器件，不是“免费紫外光”，也不是已部署技术的证明。

不说套话的检验

论文展示了什么：特定的 iBu-DHI/Ir(ppy)₃ 结晶固体薄膜实现了可见光到紫外光的 TTA 光子上转换，在 445 nm 处达到 1.9% 的绝对量子产率和 1.2 mW cm⁻² 的阈值，同时保持较高的荧光产率、较长的三重态寿命、较快的三重态扩散以及一定的耐氧性。其设计通过空间位阻保护 π 体系，同时保留有利于三重态能量传递的分子接触。

合理但尚未证实的推断：相同的堆积原则可以制造出性能更好的固态上转换材料；相关的无金属敏化剂体系可以优化到相近性能；这类薄膜最终可能有助于光催化或太阳能化学应用。

它没有展示什么：可工作的器件；有用的太阳能燃料或光催化产出；户外耐久性；高水平的全太阳光谱效率；经济可行性；适用于任意发色团的通用配方。

主要限制：实验室薄膜、特定材料体系、适中的绝对量子产率、最佳性能案例中使用铱供体、受控的激发波长，以及没有器件级展示。“阳光水平”只对应激发波段，而不是对完整太阳能技术的宣称。

普通读者应有多大信心？ 应当高度确信，这种材料设计改善了受测体系中的固态可见光到紫外光 TTA-UC，也应高度确信这一结果具有科学意义。但应当对它接近可部署太阳能技术这一点保持低信心。合适的态度是：这是一个巧妙而真实的材料进展——但应用故事大多还在未来。

来源

Nature Communications 17, 5134 (2026)

<https://doi.org/10.1038/s41467-026-73898-0>

Supplementary Information

https://static-content.springer.com/esm/art%3A10.1038%2Fs41467-026-73898-0/MediaObjects/41467_2026_73898_MOESM1_ESM.pdf

Source Data

https://static-content.springer.com/esm/art%3A10.1038%2Fs41467-026-73898-0/MediaObjects/41467_2026_73898_MOESM3_ESM.xlsx