



**中国科学院大学**  
University of Chinese Academy of Sciences

## 博士学位论文评阅书

论文题目 有机双发色团化合物的激发态动力学研究及应用

作者姓名 刘亚

学位类别 理学博士

学科（专业） 物理化学

研究所（院系） 大连化学物理研究所

中国科学院大学制

## 学术道德评价

（一票否决）

评价要素	评价意见（请在相应栏内划“√”）
是否存在剽窃他人成果、伪造数据、由他人代写等严重作假行为	<input type="checkbox"/> 是（具体说明存在的问题）
	<input checked="" type="checkbox"/> 否

## 评阅意见

评 价 要 素			权重	具体得分 (百分制)
1	论文选题	选题的理论意义、实用价值	10%	95
2	文献综述	反映该学科及相关领域的前人成果和前沿动态	15%	92
3	创新成果	论文成果创新性，对学科发展、技术进步、经济建设、国家安全等方面产生的影响和贡献	40%	98
4	基础理论和专门知识	基础理论的宽厚度、坚实度，专门知识的系统性、深入性	10%	95
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	96
6	论文写作	论文结构、撰写规范性；文字表达准确、清晰和流畅性；引文严谨、规范性	10%	98
总体评价			总分	96

注：“分数”栏每项均按百分制整数评分，各项满分均为100分。评分分为四档：大于等于90分为优秀；大于等于75分小于89分为良好；大于等于60分小于74分为一般；小于60分为差。

对学位论文的学术评语：（请对论文的学术水平、创新性做出简要评述，包括选题意义，文献资料的掌握，论文创新之处，写作规范和逻辑性等。还须明确指出论文中存在的问题和不足之处。可另附页）

论文题目： 有机双发色团化合物的激发态动力学研究及应用

作者姓名： 刘亚

该博士学位论文设计制备了多个系列的有机双发色团化合物，并利用飞秒瞬态吸收光谱等手段对化合物自身性质进行了深入研究，并对在三重态湮灭上转换、单线态检测等领域的应用进行了研究。论文选题新颖，实验方案合理，数据翔实，结论可信，创新性较强。论文撰写符合规范，达到了博士学位论文的要求，建议按时进行博士学位论文答辩。

仅建议对少数几处文字进行修改：第15页，‘探测光路’一段中，‘讲过’应改为‘经过’；化合物分子结构表征部分<sup>1</sup>H NMR等光谱数据的报道格式要修改下（斜体和空格的使用）；39页图2.5的图标注（说明）最好调整到一页上；61页也有类似情况。

是否同意组织学位论文答辩

（请在相应栏内划“√”）

☒ 同意答辩

☐ 修改后答辩

☐ 不同意答辩

## 学术道德评价

（一票否决）

评价要素	评价意见（请在相应栏内划“√”）
是否存在剽窃他人成果、伪造数据、由他人代写等严重作假行为	<input type="checkbox"/> 是（具体说明存在的问题）
	<input checked="" type="checkbox"/> 否

## 评阅意见

评 价 要 素			权重	具体得分 (百分制)
1	论文选题	选题的理论意义、实用价值	10%	100
2	文献综述	反映该学科及相关领域的前人成果和前沿动态	15%	94
3	创新成果	论文成果创新性，对学科发展、技术进步、经济建设、国家安全等方面产生的影响和贡献	40%	93
4	基础理论和专门知识	基础理论的宽厚度、坚实度，专门知识的系统性、深入性	10%	94
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	94
6	论文写作	论文结构、撰写规范性；文字表达准确、清晰和流畅性；引文严谨、规范性	10%	93
总体评价			总分	94

注：“分数”栏每项均按百分制整数评分，各项满分均为 100 分。评分分为四档：大于等于 90 分为优秀；大于等于 75 分小于 89 分为良好；大于等于 60 分小于 74 分为一般；小于 60 分为差。

对学位论文的学术评语：（请对论文的学术水平、创新性做出简要评述，包括选题意义，文献资料的掌握，论文创新之处，写作规范和逻辑性等。还须明确指出论文中存在的问题和不足之处。可另附页）

论文题目： 有机双发色团化合物的激发态动力学研究及应用

作者姓名： 刘亚

论文作者采用稳态纳秒时间分辨光谱及电化学分析技术和密度泛函理论研究了三种有机双发色团化合物的激发态性质和发光机理，探讨了三种有机双发色团化合物在三重态-三重态湮灭上转换和荧光探针测量中的应用。论文选题具有重要的学术价值和应用背景。

作者设计并合成了双发色团化合物 HB-An，利用溶剂极性调节其激发态性质，并通过调节三重态-三重态上转换来调控其发光性质，上转换量子产率达 25.5%；作者设计并合成了三种具有不同系间穿越量子效率的 BDP 二聚物分子，分析了分子结构与激发态性质，探讨了光物理过程和系间穿越机理；设计并合成了 BDP- $\pi$ -An（BA1 和 BA2）化合物分子，用作检测  $^1\text{O}_2$  的荧光探针。这些研究工作均具有原创性。

论文写作较规范，逻辑严谨，结论正确，是一篇优秀的博士学位论文。

是否同意组织学位论文答辩

（请在相应栏内划“√”）

☒ 同意答辩

☐ 修改后答辩

☐ 不同意答辩

## 学术道德评价

（一票否决）

评价要素	评价意见（请在相应栏内划“√”）
是否存在剽窃他人成果、伪造数据、由他人代写等严重作假行为	<input type="checkbox"/> 是（具体说明存在的问题）
	<input checked="" type="checkbox"/> 否

## 评阅意见

评 价 要 素			权重	具体得分 (百分制)
1	论文选题	选题的理论意义、实用价值	10%	10
2	文献综述	反映该学科及相关领域的前人成果和前沿动态	15%	15
3	创新成果	论文成果创新性，对学科发展、技术进步、经济建设、国家安全等方面产生的影响和贡献	40%	36
4	基础理论和专门知识	基础理论的宽厚度、坚实度，专门知识的系统性、深入性	10%	9
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	14
6	论文写作	论文结构、撰写规范性；文字表达准确、清晰和流畅性；引文严谨、规范性	10%	9
总体评价			总分	93

注：“分数”栏每项均按百分制整数评分，各项满分均为 100 分。评分分为四档：大于等于 90 分为优秀；大于等于 75 分小于 89 分为良好；大于等于 60 分小于 74 分为一般；小于 60 分为差。

**对学位论文的学术评语：**（请对论文的学术水平、创新性做出简要评述，包括选题意义，文献资料的掌握，论文创新之处，写作规范和逻辑性等。还须明确指出论文中存在的问题和不足之处。可另附页）

**论文题目：** 有机双发色团化合物的激发态动力学研究及应用

**作者姓名：** 刘亚

复杂体系的激发态动力学是分子反应动力学领域中的重要研究方向。。  
论文选题具有重要的科学意义和应用价值。

本论文中，作者通过理论与实验结合的方法，采用稳态、时间分辨光谱技术，电化学分析，密度泛函（DFT）及含时密度泛函（TDDFT）计算等多种激发态动力学研究手段，探究了三个有机双发色团化合物体系的激发态动力学行为及其在三重态-三重态湮灭（TTA）上转换和荧光探针领域的应用。取得了如下的创新成果：

1、设计合成了双发色团化合物 HB-An。实验与理论研究结果表明，该分子的激发态性质具有溶剂极性依赖。将该分子作为三重态受体/发光体应用于 TTA 上转换时，TTA 上转换量子产率高达 25.5%。而且改变溶剂极性可以精细调节该 TTA 上转换体系的发光波长。

2、设计合成了一系列 BDP 二聚体分子，用实验与理论方法研究了此类双发色团化合物的激发态系间窜越机理。研究发现对称型的 BDP 二聚体分子被光激发时由于溶质-溶剂相互作用会发生对称性破坏的激发态分子内电子转移过程，其中电荷转移态的生成与衰减具有溶剂极性依赖。该类分子系间窜越过程的机理是自旋轨道电荷转移诱导的系间窜越（SOCT-ISC）。

3、作者以炔基  $\pi$  共轭基团连接  $^1\text{O}_2$  捕获基团和荧光团，设计合成了一种具有 D- $\pi$ -A 大  $\pi$  共轭分子结构，实现了溶液中专一定量检测  $^1\text{O}_2$  的荧光探针，并从实验和理论上深入研究了该体系的激发态动力学，揭示了该分子的  $^1\text{O}_2$  识别机理。

论文内容丰富，写作规范，文献综述全面，结论明确，具有很好的创新性。不足之处在于，在本论文中关于该体系激发态动力学的理论计算部分尚显不足，可以做进一步的深入研究。论文中还存在少量表述不够严谨的地方。

该论文达到了博士学位论文的要求，同意进行博士论文答辩。

是否同意组织学位论文答辩

（请在相应栏内划“√”）

☒ 同意答辩

☐ 修改后答辩

☐ 不同意答辩

## 学术道德评价

（一票否决）

评价要素	评价意见（请在相应栏内划“√”）
是否存在剽窃他人成果、伪造数据、由他人代写等严重作假行为	<input type="checkbox"/> 是（具体说明存在的问题）
	<input checked="" type="checkbox"/> 否

## 评阅意见

评 价 要 素			权重	具体得分 (百分制)
1	论文选题	选题的理论意义、实用价值	10%	89
2	文献综述	反映该学科及相关领域的前人成果和前沿动态	15%	88
3	创新成果	论文成果创新性，对学科发展、技术进步、经济建设、国家安全等方面产生的影响和贡献	40%	90
4	基础理论和专门知识	基础理论的宽厚度、坚实度，专门知识的系统性、深入性	10%	91
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	92
6	论文写作	论文结构、撰写规范性；文字表达准确、清晰和流畅性；引文严谨、规范性	10%	90
总体评价			总分	90

注：“分数”栏每项均按百分制整数评分，各项满分均为 100 分。评分分为四档：大于等于 90 分为优秀；大于等于 75 分小于 89 分为良好；大于等于 60 分小于 74 分为一般；小于 60 分为差。



本文主要利用密度泛函和含时密度泛函理论与稳态、时间分辨光谱技术等实验方法相结合，深入研究了三个有机双发色团化合物体系的激发态动力学行为及其在三重态-三重态湮灭(TTA)上转换和荧光探针领域的应用。论文选题新颖，并得到了一些非常有意义的创新性研究成果。(1)设计合成了双发色团化合物 HB-An，通过溶剂极性调控其发光性质，并应用于调控 TTA 上转换发光。HB-An 分子的激发态性质具有溶剂极性依赖。在弱极性溶剂中，最低激发态是一个兼具局域激发和电荷转移两种特性的溶剂弛豫激发态，R<sub>S1</sub>，具有高荧光量子产率和较长的荧光寿命。改变溶剂极性可以精细调节该 TTA 上转换体系的发光波长，从蓝紫光到黄光。(2)设计合成了一系列 BDP 二聚体分子以系统地研究此类双发色团化合物的激发态系间窜越机理。研究发现对称型的 BDP 二聚体分子被光激发时由于溶质-溶剂相互作用会发生对称性破坏的激发态分子内电子转移过程。但只有类正交构型的分子才可以发生有效的系间窜越过程，证明了该类分子系间窜越过程的机理是自旋轨道电荷转移诱导的系间窜越(SOCT-ISC)。(3)提供了一种新的 1O<sub>2</sub> 荧光探针的设计原则，以炔基  $\pi$  共轭基团连接 1O<sub>2</sub> 捕获基团和荧光团，设计合成了一种可用于溶液中专一定量检测 1O<sub>2</sub> 的 OFF-ON 型荧光探针和吸收比率型探针，BA1 和 BA2。BDP- $\pi$ -An 的荧光淬灭效率比 BDP-An 分子更高。通过构造 D- $\pi$ -A 大  $\pi$  共轭分子结构，得到了比较紧凑连接的 D-A 分子更有效的荧光淬灭效率，且阻断了其 ISC 跃迁途径。

论文反映出作者在分子激发态动力学领域开展了比较深入的研究，具有扎实的基础知识和相关的专业知识，具有独立从事科研工作能力。该论文语言流畅，文字图表清晰，内容充实，结果可信。是一篇具有较高学术价值的优秀博士学位论文。建议进行论文答辩并授予博士学位。

是否同意组织学位论文答辩  
(请在相应栏内划“√”)

☒ 同意答辩

☐ 修改后答辩

☐ 不同意答辩

## 学术道德评价

(一票否决)

评价要素	评价意见 (请在相应栏内划“√”)
是否存在剽窃他人成果、伪造数据、由他人代写等严重作假行为	<input type="checkbox"/> 是 (具体说明存在的问题)
	<input checked="" type="checkbox"/> 否

## 评阅意见

评 价 要 素			权重	具体得分 (百分制)
1	论文选题	选题的理论意义、实用价值	10%	90
2	文献综述	反映该学科及相关领域的前人成果和前沿动态	15%	100
3	创新成果	论文成果创新性, 对学科发展、技术进步、经济建设、国家安全等方面产生的影响和贡献	40%	90
4	基础理论和专门知识	基础理论的宽厚度、坚实度, 专门知识的系统性、深入性	10%	90
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	92
6	论文写作	论文结构、撰写规范性; 文字表达准确、清晰和流畅性; 引文严谨、规范性	10%	90
总体评价			总分	91.8

注: “分数”栏每项均按百分制整数评分, 各项满分均为 100 分。评分分为四档: 大于等于 90 分为优秀; 大于等于 75 分小于 89 分为良好; 大于等于 60 分小于 74 分为一般; 小于 60 分为差。

对学位论文的学术评语：（请对论文的学术水平、创新性做出简要评述，包括选题意义，文献资料的掌握，论文创新之处，写作规范和逻辑性等。还须明确指出论文中存在的问题和不足之处。可另附页）

论文题目： 有机双发色团化合物的激发态动力学研究及应用

作者姓名： 刘亚

该论文以光功能材料为中心，采用多种光谱实验方法，与理论计算紧密结合，研究了一系列有机双发色团化合物体系的激发态动力学行为，以及它们在荧光探针领域的应用，取得了创新性的研究成果。

论文工作量大，数据可靠，分析合理，表述清晰，是一篇优秀的博士学位论文。

不足之处：论文的英文封面，作者和导师的英文名字应该是 Ya Liu 和 Keli Han。

是否同意组织学位论文答辩

（请在相应栏内划“√”）

☒ 同意答辩

☐ 修改后答辩

☐ 不同意答辩