



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 含时密度泛函方法研究荧光化学传感器

的传感机理

作者姓名 李杨

学位类别 理学博士

学科（专业） 物理化学

研究所（院系） 中国科学院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%	95
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%	98
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	95
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	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： 含时密度泛函方法研究荧光化学传感器的传感机理

作者姓名： 李杨

该论文以密度泛函和含时密度泛函理论为基础，主要针对 4 种荧光化学传感器体系的激发态动力学进行了深入研究和详细讨论，通过理论和前人实验相结合的方式，揭示了传感机理。

该论文在以下几个部分获得创新性成果：首先研究了一种氟离子传感器分子的传感机理。主要由于氟离子与传感器分子发生亲核加成反应，破坏了乙烯基的共轭结构，阻碍了分子内电荷转移过程，从而得到明显的蓝移和荧光增强现象。其次研究了硫化氢传感分子 HBTTP-S 的传感机理。硫氢根离子通过与 HBTTP-S 发生硫解反应，使得产物发射强荧光。激发态分子内电荷转移和扭转分子内电荷转移的耦合过程起重要作用。再次研究了氟离子传感器分子 BODIPY 的传感机理。氟离子与水分子形成氢键复合物，增强的激发态氢键与分子内电荷转移导致氢键复合物的荧光强度减弱而产生检测信号。最后研究了谷胱甘肽传感分子的传感机理。传感分子的第一激发态具有较强的分子内电荷分离特性，去除叠氮基团后，传感分子只有较弱的分子内电荷分离性质，因此发射强烈荧光。该工作的特色在于在于对各种传感分子机理细致的分析，并提供分子进一步设计的理论指导。

论文写作规范，逻辑性强，对文献掌握较好，是一篇不错的科研论文。

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%	37
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%	8
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：含时密度泛函方法研究荧光化学传感器的

作者姓名：李扬

传感机理

李扬同学在博士学习期间，以密度泛函理论为基础，对一种吡啶离子传感分子，硫化氢传感分子，一种氟离子传感分子和谷胱甘肽传感器分子四种传感分子的激发态动力学进行了深入研究，并和前人实验结果相比较，揭示了传感机制，为进一步发展荧光化学传感器奠定了理论基础。

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%	89
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%	91
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。

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：含时密度泛函方法研究荧光化学传感器的传感机理

作者姓名：李杨

使用理论化学的方法研究荧光探针的发光机制，具有很好的研究价值。本论文采用含时密度泛函方法探究了4种荧光化学传感器分子的传感机理，理清了分子在激发态的电荷转移、质子转移等过程对探针分子的发光性能的影响，为设计出更好的荧光探针提供了有价值的理论依据。

该论文写作合乎学术论文规范，逻辑严谨，体现了论文作者较好的学术水平。建议组织学位论文答辩！

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%	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%	90
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%	90
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。

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：含时密度泛函方法研究荧光化学传感器的
作者姓名：李杨的传感机理

本文利用含时密度泛函方法研究了一系列荧光传感分子的荧光传感机理，进而识别底物的紫外可见吸收光谱以及荧光发光光谱的变化进行了成功解释。论文选题新颖，实验结果具有创新性，论文撰写符合规范，达到了博士学位论文的要求。建议进行少数几处格式改动，如11页、15页、17页中部分方程中字符显示存在问题，有的章节中分子式太小，不清楚。建议按时进行博士学位论文答辩。

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%	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%	38
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	95

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：实时密度泛函方法研究荧光化学传感器的
作者姓名：李杨 传感机理

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

李杨博士论文评审意见（导师韩克利，刘建勇）
“含时密度泛函方法研究荧光化学传感器的传感机理”

2019-03-30

荧光化学传感器是检测环境中特定物质信息的一种重要手段。由于荧光化学传感器高灵敏度、高选择性等诸多优势，其被广泛的应用在污染物和生物活性物质的检测中。对于传感机理的探索，是发展荧光化学传感器的关键。论文选题具有重要科学意义和应用价值。

论文以密度泛函和含时密度泛函理论为基础，分别对氰离子传感器分子（M1），硫化氢传感器分子（HBTPP-S），氟离子传感器分子（1c）以及谷胱甘肽传感器分子（AHBO）等四种不同类型的荧光化学传感器的基态和激发态结构进行了模拟，从前线轨道和电子结构出发，探索了这四种类型的荧光化学传感器的传感机理，分析了材料结构和光物理化学性能之间的关系，为新的传感器的设计提供了理论基础。

上述研究成果具有创新性。

论文研究目标明确，思路清晰，实验数据分析合理，结论可信，创新性强。表明作者具有扎实的基础理论知识和专业知识，具有独立科学研究工作的能力，达到了博士论文学位的要求。同意答辩，建议授予博士学位。