2020年国家自然科学奖项目提名公示内容

一、项目名称：有机电子给体-受体功能分子体系的设计合成与性能调控

二、提名单位：北京市

三、提名单位意见：

该项目属于有机功能材料化学前沿交叉领域。围绕如何通过改变电子给体/受体的结构，精准调控电子/能量转移过程、能级结构以及分子间相互作用等关键科学问题开展了创新性研究，合成了系列结构新颖的电子给体-受体功能分子，深入研究其在外界刺激影响下结构和光谱的变化规律，创新性地构建了新型双稳态、多稳态分子体系，发展了系列新型分子开关、分子逻辑器件，并发现了金属离子诱导的电子转移等新现象。通过调节电子给-受体之间的相互作用，建立了调控分子聚集态的新策略，构筑了智能型分子凝胶，提出并建立了高性能有机半导体制备新方法。该项目取得了一系列创新性的研究成果，有力促进了有机化学与材料科学的交叉研究以及分子材料和器件研究领域的发展，引领了有机功能材料化学的研究。

八篇代表性论文发表在*J. Am. Chem. Soc.* (5)和*Adv. Mater.*（3）上，SCI他引1033次。研究成果受到包括诺贝尔奖获得者在内的国内外科学家的积极评价和正面引用，所提出的功能分子设计策略被同行采纳应用。该项目获得2015年度北京市科学技术奖一等奖。

提名该项目为国家自然科学奖等二等奖。

四、项目简介（不超过1页）：

有机给体-受体功能分子体系的研究是有机功能材料化学的前沿交叉领域，具有极其重要的科学意义和应用前景。该项目围绕如何通过改变电子给体/受体结构，精准调控电子/能量转移、能级结构以及分子间相互作用等关键科学问题，创新性地构建了双稳态、多稳态分子体系，发展了新概念的分子开关、分子逻辑器件，建立了调控分子聚集态的新策略，提出了高性能有机半导体尤其是双极性有机半导体的制备新方法。主要科学发现如下：

1、**通过调控有机给体-受体分子体系内的电子/能量转移，建立了构建双稳态/多稳态分子体系的新策略。**设计合成了含有光响应、氧化/还原反应响应以及金属离子作用响应的螺吡喃、四硫富瓦烯等单元的有机给体-受体分子，发现并建立了可逆调控电子转移反应的新机制。通过对电子/能量转移过程的调控，实现对蒽与单线态氧以及蒽光二聚反应的调控，构建了以电子光谱为检测信号的双稳态/多稳态分子体系，率先构建了第一个三输入信号的AND逻辑门、第一个单分子半加器、氧化/还原响应的可逆荧光开关和门控分子开关，有力促进了分子器件领域的发展。

2、**通过调节电子给体/受体分子间的相互作用，建立制备响应性分子凝胶的新方法。**设计合成了系列含有四硫富瓦烯（TTF）的凝胶因子，发现利用TTF与电子受体的电荷转移作用，可以引发凝胶态到溶液态的可控转化，并进一步利用TTF的可逆氧化还原特性，调控分子间的相互作用，实现凝胶态和溶液态间的可逆转化，制备了第一个基于TTF的刺激响应的分子凝胶以及系列多刺激信号响应的分子凝胶，提出了设计响应性分子凝胶的新策略。

3、**通过调节有机给体/受体分子内和分子间的相互作用，实现对有机半导体传输性能的调控**。设计合成系列共轭有机给体-受体分子，实现对HOMO/LUMO 能级的调控，进而成功调控其固态下的空穴和电子的传输性质。特别是利用电子给受体分子间作用，制备了有机给体和受体的共晶，发展了高性能的双极性有机半导体，为双极性有机半导体的制备提供了一条简单高效的途径。突破了通过改变给体或受体的结构来提高迁移率的局限，创新性地首次将具有氢键和静电作用的脲基团或者季铵盐引入烷基侧链中，大幅提升有机半导体的性能，有力推动了有机半导体领域的发展。

代表性研究成果发表在*JACS* (5)和*Adv. Mater.* (3)上**，**受到包括诺贝尔奖获得者Feringa等国内外科学家的引用和重点介绍，并以“***the first****,* ***elegant examples****，****attractive****，****successful idea***”等指出了研究成果的原创性和重要意义，被*Nature Mater., Nature Nanotech.*等期刊重点评述和引用1033次，被*Nature China*，*Materials Views-China*和*Synfacts*等著名学术网站和杂志作为研究亮点报道。所提出的功能分子设计策略被同行采纳应用，引领了有机给体-受体功能分子领域的发展。该项目获得2015年度北京市科学技术奖一等奖。

**五、代表性论文（专著）目录**（不超过8篇）：

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 序号 | 论文（专著）  名称/刊名  /作者 | 年卷页码  （xx年xx卷  xx页） | 发表时间 | 通讯  作者（含  共同） | 第一  作者（含  共同） | 国内作者 | 他引总次数 | 检索数据库 | 论文署名单位是否包含国外单位 |
| 1 | Intramolecular electron transfer within the substituted tetrathiafulvalene-quinone dyads: Facilitated by metal ion and photomodulation in the presence of spiropyran /*J. Am. Chem. Soc. /*Hui Wu, Deqing Zhang, Lei Su, Kei Ohkubo, Chunxi Zhang, Shiwei Yin, Lanqun Mao, Zhigang Shuai, Shunichi Fukuzumi, Daoben Zhu | 2007年  129卷  6839页 | 2007-05-08 | Deqing Zhang，  Daoben Zhu | Hui Wu | 邬慧，  张德清，  苏磊，  张纯喜，  尹世伟，  毛兰群，  帅志刚，  朱道本 | 59 | SCI | 是 |
| 2 | Logic control of the fluorescence of a new dyad, spiropyran-perylenediimide -spiropyran, with light, ferric ion, and proton: Construction of a new three-input "AND" logic gate /*Adv. Mater.* /XuefengGuo, Deqing Zhang, Daoben Zhu | 2004年  16卷  125页 | 2004-01-16 | Deqing Zhang，  Daoben Zhu | Xuefeng Guo | 郭雪峰，  张德清，  朱道本 | 98 | SCI | 否 |
| 3 | 4,5-Dimethylthio-4'-[2-(9-anthryloxy)ethylt-hio] tetrathiafulvalene, a highly selective and sensitive chemiluminescence probe for singlet oxygen /*J. Am. Chem . Soc.* /Xiaohua Li, Guanxin Zhang, Huimin Ma, Deqing Zhang, Jun Li, Daoben Zhu | 2004年  126卷11543页 | 2004-08-26 | Huimin Ma, Deqing Zhang，  Daoben Zhu | Xiaohua Li | 李晓花，  张关心，  马会民，  张德清，  李军，  朱道本 | 160 | SCI | 否 |
| 4 | A low-molecular-mass gelator with an electroactive tetrathiafulvalene group: Tuning the gel formation by charge-transfer interaction and oxidation /*J. Am. Chem. Soc.* /Cheng Wang, Deqing Zhang, Daoben Zhu | 2005年  127卷16372页 | 2005-11-08 | Deqing Zhang，  Daoben Zhu | Cheng Wang | 汪成，  张德清，  朱道本 | 219 | SCI | 否 |
| 5 | Multistimuli responsive organogels based on a new gelator featuring tetrathiafulvalene and azobenzene groups: Reversible tuning of the gel−sol transition by redox reactions and light irradiation ***/****J. Am. Chem. Soc.**/* Cheng Wang, Qun Chen, Fei Sun, Deqing Zhang, Guanxin Zhang, Yanyan Huang, Rui Zhao and Daoben Zhu | 2010年  132卷 3092页 | 2010-02-16 | Deqing Zhang | Cheng Wang | 汪成，  陈群，  孙飞，  张德清，  张关心，  黄嫣嫣，  赵睿，  朱道本 | 210 | SCI | 否 |
| 6 | New Organic Semiconductors with Imide/Amide-Containing Molecular Systems /*Adv. Mater.* ***/*** Zitong Liu, Guanxin Zhang, Zhengxu Cai, Xin Chen, Hewei Luo, Yonghai Li, Jianguo Wang, Deqing Zhang | 2014年  26卷  6965页 | 2014-03-14 | Guanxin Zhang | Zitong Liu | 刘子桐，  张关心，  蔡政旭，陈欣，  罗河伟，  李永海，  王建国，  张德清 | 106 | SCI | 否 |
| 7 | Sulfur-Bridged Annulene- TCNQ Co-Crystal: A Self-Assembled ‘‘Molecular Level Heterojunction’’ with Air Stable Ambipolar Charge Transport Behavior /*Adv. Mater.* /Jing Zhang, Hua Geng, Tarunpreet Singh Virk, Yan Zhao, Jiahui Tan, Chong-an Di, Wei Xu, Kamaljit Singh, Wenping Hu, ZhigangShuai, Yunqi Liu, Daoben Zhu | 2012年  24卷  2603页 | 2012-04-13 | Wei Xu,  Zhigang Shuai, Daoben Zhu | Jing Zhang | 张敬，  耿华，  赵岩，  谭甲辉，  狄重安，  徐伟，  胡文平，  帅志刚，  刘云圻，  朱道本 | 76 | SCI | 是 |
| 8 | Significant Improvement of Semiconducting Performance of the Diketopyrrolopyrrole− Quaterthiophene Conjugated Polymer through Side-Chain Engineering via Hydrogen-Bonding/ *J. Am. Chem. Soc.*/ Jingjing Yao, Chenmin Yu, Zitong Liu, Hewei Luo, Yang Yang, Guanxin Zhang, and Deqing Zhang | 2016年 138卷  173页 | 2015-12-16 | Zitong Liu，  Deqing Zhang | Jingjing Yao | 姚晶晶，  虞辰敏，  刘子桐，  罗河伟，  杨旸，  张关心，  张德清 | 105 | SCI | 否 |
| 合计 | | | | | | | 1033 |  |  |

六、主要完成人情况（一、二等奖不超过5人）：

| **排序** | **姓名** | **对本项目重要科学发现的贡献** | **工作单位** | **完成单位** | **职称** | **职务** |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 1 | 张德清 | 第1完成人。  本项目的负责人，负责项目研究内容的整体设计，提出了总体学术思想，直接指导项目组开展电子给体-受体功能分子研究。提出并建立了利用给体-受体分子构建双稳态/多稳态分子体系的新策略，发展了新概念分子器件；提出了设计响应性分子凝胶的新策略，创建了多刺激响应小分子凝胶；提出了利用功能侧链制备高性能半导体的新策略。对重要科学发现点1-3均作出了重要贡献，是代表性论文1-5和8的通讯作者。 | 中国科学院化学研究所 | 中国科学院化学研究所 | 研究员 | 所长 |
| 2 | 朱道本 | 第2完成人。  项目的学术指导，对发现点1-3均作出重要贡献，尤其是提出了利用给体-受体共晶发展双极性半导体材料的新策略。是代表性论文1, 2，3, 4, 7的通讯作者。 | 中国科学院化学研究所 | 中国科学院化学研究所 | 研究员 | 有机固体院重点实验室实验室主任 |
| 3 | 郭雪峰 | 第3完成人。  最早在项目中开展了基于螺吡喃功能分子的研究，成功构建了第一个三信号输入的AND逻辑门和单分子半加器。对发现点1作出实质贡献，是代表性论文2的第一作者。 | 北京大学 | 中国科学院化学研究所 | 教授 | 无 |
| 4 | 徐伟 | 第4完成人。  通过构筑给体和受体的共晶，发展了高性能的双极性半导体材料，是代表性论文7的通讯作者。 | 中国科学院化学研究所 | 中国科学院化学研究所 | 研究员 | 有机固体院重点实验室副主任 |
| 5 | 张关心 | 第5完成人。  最早在项目中开展了基于四硫富瓦烯给体-受体功能分子研究，构建了基于四硫富瓦烯的分子开关，并通过设计合成有机给体-受体分子调控有机半导体的性能，是代表性论文6的通讯作者。 | 中国科学院化学研究所 | 中国科学院化学研究所 | 研究员 | 无 |