

---

# 提出一种“给体—受体”型自由基合成设计策略

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/16267.html>

**本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！**

提出一种“给体—受体”型自由基合成设计策略。华南理工大学材料科学与工程学院/发光材料与器件国家重点实验室副教授李远课题组提出了一种基于给体—受体型开壳自由基电子自旋基态的分子设计策略，相关成果近日发表于《自然—通讯》。华南理工大学陈仲鑫博士为论文第一作者，李远副教授、黄飞教授和美国密西西比州立大学助理教授Neeraj Rai为通讯作者。

近30年来，有机半导体基光电材料经历了长足的发展，经典的给体—受体结构设计是实现窄带隙有机半导体最为重要和有效的策略之一。这类给体—受体有机半导体具有优异的稳定性，被广泛应用于有机光电、热电、光热转换、自旋电子学及荧光生物成像等众多前沿热门领域。关于有机半导体材料和器件的理论较为丰富，然而基于新原理开发新颖的有机光电材料是当前该领域的重点和热点。

近4年，李远课题组在设计和合成大量基于给体—受体结构的开壳型窄带隙有机半导体的基础上，利用变温核磁共振、变温电子自旋共振、超低温和高温超导量子干涉仪、单晶X射线衍射、升华提纯实验，HPLC纯度验证，同分异构体对照等多种研究手段，在实验上对其电子自旋基态进行了严格的论证。

同时，借助经典自由基理论计算工具，对该系列分子的双自由基特征指数（Diradical character index,  $y_0$ ）计算表明，这类有机半导体的 $y_0$ 值可在20%至40%之间有效调控，继续延长共轭可提升至66.5%。此外，研究者对基态的单线态（ $S_0$ ）—热激发三线态（ $T_t$ ）能级、NICS、ACID等进行了计算，进一步佐证了其开壳电子自旋基态结构。

据悉，开壳自由基分子因具有独特的物理化学性质，在有机光电子学、自旋电子学、生物学及量子计算等多个领域具有潜在的应用场景。自1907年以来，大多数的开壳双自由基材料是基于多环芳烃、醌式对二甲苯醌等体系；目前，基于这类体系的材料的合成方法和应用不断取得新突破，而提升材料稳定性依然是该领域重要挑战之一。

该研究工作提出了一种基于经典给体—受体结构的稳定窄带隙开壳自由基的分子设计策略。（来源：中国科学报朱汉斌 卢庆雷）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41467-021-26173-3>

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在

---

正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。  
作者：李远等 来源：《自然—通讯》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发