

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：超冷分子散射的量子动力学研究

作者姓名：黄嘉宇

该论文着眼于当前超低温物理最前沿领域，创造性的发展了新的方法对超冷分子散射问题和分子反应几何相位效应问题进行了深入研究。

论文的内容基本覆盖了本领域相关工作中具有代表性的文献，总体来说概述全面，总结透彻。其中涉及的计算结果真实可靠，对理解超低温下化学反应过程和指导实验上制备超冷分子有重大意义。

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 否	<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%	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%	85
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。

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%	98
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%	96
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	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：超冷分子散射的量子动力学研究

作者姓名：黄嘉宇

黄嘉宇同学的博士论文主要工作是发展和利用量子多时波包方法，研究了三原子和四原子化学反应的散射动力学问题。研究成果和创新性主要表现在以下几个方面：

1. 由于低温下反应的边界处的波包难以吸收的问题，多时波包法难以用于超冷反应的量子散射计算。论文作者改进了多时波包法，解决了波包吸收的问题，并首次将其应用于超冷三原子反应 $F + H_2$ 的计算，得到了反应的反应几率，证明可以用多时波包法精确描述超冷反应。
2. 借助多时波包法，用严格的量子动力学计算方法首次完成了四原子超冷反应 $OH + H_2 (v=2, j=0) \rightarrow H_2O + H$ 的反应几率、积分截面和速率常数的计算。
3. 提出了一种基于向量势的绝热表象的方法，研究了研究化学反应中的几何相位效应，用 $H + HD \rightarrow H_2 + D$ 反应和 $H + H_2 (v=4, j=0) \rightarrow H_2 + H$ 反应为例，证明了该方法具有高效、精确的特点，可以很好的描述反应中的几何相位效应，并有望进一步推广到其他更复杂的反应体系。

本论文写作规范，逻辑性强，文献资料全面。可以看出作者理论基础扎实，具有良好的科研素质和独立从事科研的能力，是一篇优秀的博士论文。同意进行博士学位答辩。

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%	96
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%	95
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%	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%	96
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：_____

作者姓名：_____

超冷分子在物理、化学等各个学科领域有着重要的理论和应用价值。含时波包方法是目前量子动力学最先进的计算方法，但是利用该方法处理冷分子碰撞时必须克服波包传播缓慢、吸收势过长等缺点。围绕这个目的，该文改进了吸收势方案，在势能面上不同的区域采用不同的吸收势，使得低速波包在吸收势区域传播时长不再是计算量的瓶颈，并进行了 $F+H_2$ 体系超低温反应速率的精确计算。又将该方法应用于振动激发的 $H_2+OH \rightarrow H_2O+H$ 反应体系，计算了反应速率和产物振转态分布。还发展了向量势逢热表象方法，研究了 $O+OH$ 反应中几何相位效应的机理，首次揭示了超低温分子反应几何相位效应的动力学来源。

本文选题前沿，目的明确，研究成果具有重要的理论意义。作者具有坚实的理论基础，具有强的独立科研能力和创新能力。论文条理清晰，结构严谨，逻辑性强，文笔流畅，格式规范，研究成果具有原创性，是一篇优秀的博士研究生论文。

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%	13
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%	10
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	15
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%	10
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：超冷分子散射的量子动力学研究

作者姓名：黄嘉宇

超冷分子散射是当前研究的前沿与热点之一。论文作者采用量子含时波包方法研究了 $F + H_2$ 、 $H_2(v=2) + OH$ 等反应在超冷条件下的动力学行为，取得了很好的研究成果，对理解超冷条件下的反应动力学具有重要意义。

论文选题具有重要理论意义，内容清晰，写作规范，体现了作者具有很好的科研素养与科研工作能力，是一篇优秀的博士论文。

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%	13
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	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：超冷分子散射的量子动力学研究

作者姓名：黄嘉宇

论文选题紧扣动力学的重要课题，对超冷分子量子散射理论进行发展，克服波包的边界吸收问题，将含时波包方法应用于超冷反应散射的理论研究。论文工作量充实，创新点突出，为认识超冷分子反应提供了理论依据，论文撰写规范逻辑清晰，达到了博士学位论文的水平要求。建议最后增加总结与展望，为后续科研工作开展提供参考。

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