

## 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%	80
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%	80
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	93.3
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：过渡金属晶相和形貌调控的催化理论研究

作者姓名：林 浩

金属催化剂的晶相效应是多相催化中的一个重要现象，本论文利用密度泛函理论的计算方法，对金属催化剂晶相、反应气氛和结构敏感性进行了研究，得到了系列的创新性成果。研究了过渡金属体相能量和表面能的补偿效应。发现常温条件下稳定相是 hcp 的金属，相应的 hcp 晶相表面能要高于 fcc 晶相的表面能；而对于常温条件下稳定相为 fcc 的金属则具有相反的趋势；由此建立了 fcc 和 hcp 相之间的表面能差与相应的体相能差的负线性关系。可以利用这一结果解释许多实验现象。研究费托反应气氛诱导金属 Co 粒子形貌的变化。建立了 fccCo 和 hcpCo 的表面能相图与 CO 化学势的关系，得出不同 CO 气氛下两种晶相 Co 粒子的形貌演变趋势。研究了 N<sub>2</sub> 解离过程中金属 Ru 催化剂形貌和晶相结构敏感性，为设计和优化高活性合成氨 Ru 催化剂提供理论基础。论文研究内容丰富、三个部分自成体系，都有很好的归纳和总结，同时要考虑三个部分之间的逻辑关系，如何构成一个有机的博士论文内容。论文数据分析合理、论文书写规范，符合博士论文的要求，建议进行博士论文答辩。

是否同意组织学位论文答辩 (请在相应栏内划“√”)	<input checked="" type="checkbox"/> 同意答辩	<input type="checkbox"/> 修改后答辩	<input type="checkbox"/> 不同意答辩
评阅人签名	h123	工作单位	日期

## 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%	1493.3
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%	3895
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%	80
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	1386.7
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%	100
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：过渡金属晶相和形貌调控的催化理论研究

作者姓名：林浩

本论文以费托合成和合成氨两个重要催化反应为具体实例，采用密度泛函理论，系统研究了表面能、分子学势、反应气体等对金属晶面的影响，对设计和理解实际催化剂具有重要的理论指导意义。

文献引用恰当充分，论文写作规范逻辑，达到博士论文要求。

尚需完善之处如下：

1. 催化剂尺寸对于催化活性非常重要，缺少尺寸讨论。
2. 文中仅考察了 CO(费托反应)和  $H_2$ (合成氨)两种分子对晶相的影响，实际催化反应中还有  $H_2O$  等其他气体，另外温度和压力等条件也都非常重要，建议考虑这些因素对结果的影响。

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%	85
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%	85
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%	82
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%	85
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	89
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%	91
总体评价			总分	85

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：过渡金属晶相和形貌调控的催化理论研究

作者姓名：林浩

论文在费托合成和合成氨反应背景下，探索催化剂活性位结构和催化剂结构敏感性。采用密度泛函理论计算研究了①Co, Ru, Os, Ni, Rh, Pd, Ir 七种过渡金属 hcp 晶相和 fcc 晶相表面能、晶体形貌、表面能和内禀能补偿效应。②CO 覆盖度对 Co 的 hcp 晶相和 fcc 晶相过渡影响。③Ru 对  $N_2$  活化和解离的调控等。论文有较充分的背景调研和方法介绍，工作针对过渡金属的形貌和表面能、气体吸附和解离中晶相形貌的调控转变，从能量、电子结构、热力学和微观动力学性质等展开了研究的讨论。论文具备了一定的严谨度和逻辑的分析表达。此外，图题描述过于简单，应给予更多解读信息。图 3.2 的图例并没有给出晶面 (320)，然而表 3.2 却给了数据，应给予相应解释。

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)
	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：过渡金属晶相和形貌调控的催化理论研究

作者姓名：林浩

费托合成和合成氨反应对国民经济发展和国家安全具有战略意义。金属钴因为具有较高的链增长反应活性和 C5+ 选择性等优点，是费托合成反应中的最重要的催化剂之一；金属钌因为在合成氨反应中的低温活性也具有广阔前景。论文选择过渡金属晶相和形貌调控的催化理论作为研究内容，具有重要的学术价值。

论文利用密度泛函理论的计算方法，对金属催化剂晶相、反应气氛和结构敏感性进行研究，得到如下结果：(1) 过渡金属体相能和表面能的补偿效应，过渡金属的晶相和表面能对多相催化的活性、选择性和稳定性至关重要，对 Co、Ni、Ru、Rh、Pd、Os 和 Ir 七种金属的 hcp 和 fcc 晶相进行了全面的密度泛函理论计算研究，对于 CoRuOs 在常温下稳定相是 hcp，而对 Ni、Rh、Pd 和 Ir 则在常温下 fcc 为稳定相，建立了 fcc 和 hcp 相之间的表面能差对于相应的体相能差的负线性关系；(2) 反应气氛诱导金属钴粒子形貌的演变，建立了 fcc Co 和 hcp Co 的表面能相图与 CO 化学式的函数关系；(3) 通过金属钌晶相调控氮气活化，理论计算表明，在 hcp Ru 形貌中，{2130}面具有最高的氮气解离活性，在 fcc Ru 形貌中，{211}和{311}表面上氮气解离活性最高。

上述研究结果具有创新性。

论文达到了博士学位论文的要求。

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%	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%	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%	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	90.2

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： 过渡金属晶相和形貌调控的催化理论研究

作者姓名： 林 浩

《过渡金属晶相和形貌调控的催化理论研究》首先考察了七种(I类Co, Ru, Os; 和II类Ni, Rh, Pd, Ir)金属的面心(fcc)立方和六方(hcp)晶相热力学平衡晶体形貌，发现体相能量高(低)的晶相倾向形成表面能低(高)的热力学平衡晶体，首次提出了体相能量与晶体表面能之间的补偿效应的概念。I类金属的fcc和hcp晶相表面能差大于II类金属的，故I类金属的晶体发生晶相转变更为容易，这与实验观察现象符合。随后作者运用从头算热力学考察了hcp相Co和fcc相Co在一氧化碳吸附诱导下的晶粒形貌演变。低覆盖度下平衡形貌中有较多的开放表面，而在高覆盖度下fcc相的钴形成完全由{111}组成的八面体晶粒，而hcp相Co则形成以{0001}和{10 $\bar{1}$ 0}组成的六棱柱。最后作者采用微观动力学研究了Ru对N<sub>2</sub>分解的结构敏感性。hcp相的{21 $\bar{1}$ 0}、特别是fcc相的{211}面活性最大。fcc的Ru比hcp的Ru对氮的转化活性大。

论文选题关注多相催化领域中十分重要的形貌结构问题，围绕金属的晶相结构在真空和反应气氛下的平衡形貌以及表面形貌结构与催化性能关系展开研究，作者基于第一性原理计算，从热力学和微观动力学方面对结果进行了分析，解释了有关实验现象，为金属催化剂的活性调控、晶相设计提供了参考，加深了我们对结构敏感性的认识。论文撰写规范，分析合理，语言流畅，图表清晰；如能拓展工作，如考虑多种物种(如氧原子等)吸附诱导的多种金属的晶体形貌变化，内容更丰富，指导意义将大为提高。

陈兆旭

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

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：过渡金属晶相和形貌调控的催化理论研究

作者姓名：林浩

《过渡金属晶相和形貌调控的催化理论研究》首先考察了七种(I类Co, Ru, Os; 和II类Ni, Rh, Pd, Ir)金属的面心(fcc)立方和六方(hcp)晶相热力学平衡晶形貌，发现体相能量高(低)的晶相倾向形成表面能低(高)的热力学平衡晶体，首次提出了体相能量与晶体表面能之间的补偿效应的概念。I类金属的fcc和hcp晶相表面能差大于II类金属的，故I类金属的晶体发生晶相转变更为容易，这与实验观察现象符合。随后作者运用从头算热力学考察了hcp相Co和fcc相Co在一氧化碳吸附诱导下的晶粒形貌演变。低覆盖度下平衡形貌中有较多的开放表面，而在高覆盖度下fcc相的晶粒形成完全由{111}组成的八面体晶粒，而hcp相Co则形成以{0001}和{10 $\bar{1}$ 0}组成的六棱柱。最后作者采用微观动力学研究了Ru对N<sub>2</sub>分解的结构敏感性，hcp相的{21 $\bar{3}$ 0}，特别是fcc相的{211}面活性最大。fcc的Ru比hcp的Ru对氮的转化活性大。

论文选题关注多相催化领域中十分重要的形貌结构问题，围绕金属的晶相结构在真空和反应气氛下的平衡形貌以及表面形貌结构与催化性能关系展开研究。作者基于第一性原理计算，从热力学和微观动力学方面对结果进行了分析，解释了有关实验现象，为金属催化剂的活性调控、晶相设计提供了参考，加深了我们对结构敏感性的认识。论文撰写规范，分析合理，语言流畅，图表清晰；如能拓展工作，如考虑多种物种(如氧原子等)吸附诱导的多种金属的晶体形貌变化，内容更丰富，指导意义将大为提高。

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