



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 含能材料体系热解离和检测机理的理论研究

作者姓名 马银华

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%	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%	10
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%	10
总体评价			总分	97

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：含能材料体系热解离和检测机理的理论研究

作者姓名：马银华

论文作者针对具有重要意义含能材料分子，采用PFT和QM/MM等理论计算方法，开展了一系列详细的研究，包括Fox-7和RDX分子的详细初始解离机制，并研究了探针分子Nph-An和ITTPs对含能材料TNP的荧光传感机理。这些研究结论，对于深入理解相关爆炸过程和激发态动力学有重要的参考意义。
论文写作规范，逻辑清晰，文字流畅，创新性强，建议按期答辩。

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%	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%	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%	93
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%	94
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	92
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	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：含能材料体系热解离和检测机理的理论研究

作者姓名：马银华

含能材料的热解离机理及其检测对军事国防和航天发展至关重要，是题具有重要意义。论文作者采用实验论证、含时密度泛函、以及量子化学/分子力学组合的方法对含能材料 FOX-7, RDX 的晶相解离机理进行了研究，并探讨了 RDX 与其解离小分子产物之间的双分子反应；对含能材料 TNP，研究了荧光探针 Nph-An 和 ITTP 对其检测的机理，发现了荧光探针吸附过程为这两种荧光探针检测 TNP 的检测机理。

论文采用方法得当，撰写规范，表明作者在本学科领域查阅了大量相关文献，掌握了坚实的基础理论知识，具备从事本学科相关科研工作的能力。马银华同学的论文达到了博士学位论文的水平，建议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%	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%	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%	89
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	92
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	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）

本文主要利用量子化学理论方法研究了几种含能材料的解离机理及其检测机理。含能材料研究具有重要的军事国防价值，论文选题新颖，并得到了一些非常有意义的创新性研究成果。（1）利用 ONIOM 方法建立新的理论模型，研究了含能材料 FOX-7 和 RDX 晶相初始解离机理。研究发现晶相环境中 FOX-7 和 RDX 解离反应的发生要难于气相环境，反应能垒明显升高。同时由于笼蔽效应可能导致解离产生的小分子难以逃离，易于与邻近分子结合产生新的反应路径。（2）进一步深入研究了 RDX 与其初始解离产生的小分子间可能的双分子反应。研究发现最先产生的小分子 NO_2 会对 RDX 解离起到催化解离的作用，同时 OH 的产生会引起 RDX 初始解离过程中的较大放能。（3）研究了探针分子 Nph-An 和 ITTPs 对含能材料 TNP 的荧光传感机理。对于 Nph-An 体系，其荧光猝灭机理为光致电子转移过程，同时增强的激发态氢键也会促进 PET 过程，影响体系的荧光猝灭。对于 ITTPs 体系，探针分子主要与 TNP 分子通过 π - π 堆积的方式结合，传感机理为光致电子转移过程。

论文反映出作者在含能材料的动力学模拟领域开展了比较深入的研究，具有扎实的基础知识和相关的专业知识，具有独立从事科研工作能力。该论文语言流畅，文字图表清晰，内容充实，结果可信，是一篇具有较高学术价值的优秀博士学位论文。建议进行论文答辩并授予博士学位。

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%	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%	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%	92
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%	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%	92
总体评价			总分	93.8

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90分为良好;大于等于60分小于75分为中;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： 含能材料体系热解离和检测机理的理论研究

作者姓名： 马银华

含能材料是一类非常重要的化学材料，在国防和工业领域被广泛使用。含能材料的性能，特别是感度与微观结构的关系含能材料研究领域亟待解决的重要的科学问题。通过对含能材料爆炸初期的反应机理的理论研究，有助于深刻理解含能材料的性质与结构的关系，选题具有重要的科学意义。

该论文中，作者采用量子化学计算方法对 RDX、FOX-7 的初始反应机理，以及探针分子 Nph-An 对含能材料 TNP 的荧光传感机理进行了理论研究，取得了以下的创新成果：

1. 利用 ONIOM 方法模拟了 FOX-7 和 RDX 晶相的初始解离反应。研究结果表明晶体环境中 FOX-7 和 RDX 解离反应的发生要难于气相环境，反应能垒会明显的升高。同时笼蔽效应的存在使得解离产生的小分子难以离去，可能会与邻近分子进一步结合，产生新的反应路径。晶体环境还会改变解离反应发生的选择性。

2. 利用量子化学计算研究了 RDX 与其初始解离产生的小分子之间可能的反应。研究结果表明最先产生的 NO₂ 分子会对 RDX 解离起到催化解离的作用，同时 OH 的产生会引起 RDX 初始解离过程中较大的放能。在 RDX 初始解离中，产生的小分子之间会存在相互促进，循环的关系，促使一些稳定中间体的生成，并有一定的能量释放。

3. 通过理论计算，揭示了探针分子 Nph-An 对含能材料 TNP 的荧光传感机理。Nph-An 对 TNP 的传感机理可以归结为 PET 的过程。增强的激发态氢键会促进 Nph-An+TNP 的 PET 过程，影响体系的荧光猝灭。

论文写作规范，文献综述全面，结论明确，具有较好的创新性。不足之处在于，RDX 与小分子之间的反应计算只是在气相下进行的，应进一步用 QM/MM 方法研究晶体和“热点”环境对这些反应过程的影响。

该论文达到了博士学位论文的要求，同意进行博士论文答辩。

<p>是否同意组织学位论文答辩</p> <p>（请在相应栏内划“√”）</p>	<p><input checked="" type="checkbox"/> 同意答辩</p> <p><input type="checkbox"/> 修改后答辩（论文需通过小的修改后答辩）</p> <p><input type="checkbox"/> 修改后评阅（论文需通过大的修改后再评阅）</p> <p><input type="checkbox"/> 不同意答辩</p>
---	--

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%	8
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%	32
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%	7
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	11
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%	6
总体评价			总分	77

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：含能材料体系热解离和检测机理的理论研究

作者姓名：马银华

含能材料在国防工业等领域具有广泛的应用。论文作者研究了儿种典型含能材料的热解离机理，对探索含能材料的热裂机理具有重要的指导价值；同时，通过全时密度泛函理论研究了探针分子对TNP的荧光传感机理，对实际上探测含能材料痕迹为十分重要。论文选题具有非常重要的应用价值，通过详尽的文献综述阐明了含能材料领域存在科学问题，通过理论模拟对儿类问题进行了初步探索。论文写作规范，结论正确，但对部分语言描述还需进一步规范。

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