

附件 6



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 植物防晒分子激发态动力学研究

作者姓名 赵西

学位类别 理学博士

学科（专业） 物理化学

研究所（院系） 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%	14
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%	13
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：植物防晒分子激发态动力学研究

作者姓名：赵西

论文利用超快瞬态光谱与理论计算相结合方法，研究了天然防晒分子芥子酸酯顺反异构体的激发态动力学、防晒机理的取代效应以及能量弛豫效率，研究工作做的比较深入，并取得了很好的创新成果。论文选题非常有意义，并得到了一定的社会关注。论文写作严谨，文献资料掌握全面。激发态动力学是较难的工作，论文作者在防晒模型分子的激发态动力学研究中进行了很深入地探索，对新型防晒霜的设计提供、指导。论文工作展望部分充分合理。

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%	92
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%	91
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%	94
总体评价			总分	91

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。

本文合成了几种天然植物防晒霜芥子酸酯衍生物并借助飞秒瞬态光谱和量子化学计算研究了天然植物防晒霜分子的激发态动力学过程。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) 研究了一种天然防晒分子的模型分子 MS 在顺式和反式结构下的防护机理。研究发现反式 MS 在激发态势能面上经历一个有能垒的双键扭转到达锥形交叉结构，通过非绝热方式回到基态。实验证明顺式 MS 的荧光来自于激发态反式 MS，顺式 MS 在激发态不仅有非绝热驰豫过程同时还存在一个与非绝热驰豫竞争的绝热驰豫过程。顺式 MS 在基态时苯环和酯链空间上的相互排斥是导致激发态无垒 Hula 扭转的根本原因。(2) 用飞秒瞬态吸收光谱技术和含时密度泛函研究了 MS, p-OMeMs, p-HMS 的激发态动力学。证明不同的取代会导致激发态不同驰豫机理。对于 MS, p-OMeMs, 在 $V'(\pi\pi^*)$ 态上，分子通过激发态异构化反应经过 $V'(\pi\pi^*)/S_0$ 锥形交叉结构回到基态。而 p-HMS 的激发态动力学跟 MS, p-OMeMs 的激发态动力学有很明显区别，表明即使是结构非常相近的防晒霜分子也可能表现出完全不同的激发态动力学行为。第一次明确的揭示了芥子酸酯和肉桂酸酯衍生物 $V(\pi\pi^*)$ 态和 $V'(\pi\pi^*)$ 态激发态动力学的差别。(3) 第一次对芥子酸酯类化合物进行了乙烯基上氢原子的甲基化并得到 8MeMS 和 p-OMe8MeMS。飞秒瞬态吸收光谱和量子化学研究发现对于 MS 和 p-OMeMs, 在电子激发态上通过 OBF 的扭转方式进行反/顺异构化。但是对 8MeMS 和 p-OMe8MeMS 则是在电子激发态上经过 Hula 扭转来实现反/顺异构化。

论文反映出作者在光物理光化学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“√”)	<div style="display: flex; justify-content: space-around; align-items: center;"> <div style="text-align: center;"> <input checked="" type="checkbox"/> 同意答辩 </div> <div style="text-align: center;"> <input type="checkbox"/> 修改后答辩 </div> <div style="text-align: center;"> <input type="checkbox"/> 不同意答辩 </div> </div>
------------------------------	---

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%	100
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%	100
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	96
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	96.4

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：植物防晒分子激发态动力学研究

作者姓名：赵西

该论文以天然植物防晒分子芥子酸酯为研究对象，采用先进的飞秒瞬态光谱技术实验方法，与量子化学理论计算相结合，研究不同异构体的激发态动力学，取得了一系列创新性成果。

论文工作量大，数据可靠，逻辑性强，写作规范，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%	9
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%	14
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%	9
总体评价			总分	94

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： 植物防晒分子激发态动力学研究

作者姓名： 赵西

天然植物防晒分子的激发态动力学研究，在天然产物仿生合成中具有重要应用，可以为新一代防晒分子的开发提供指导。论文选题具有重要的科学意义。

防晒分子激发态能量弛豫效率在其防晒效果中扮演重要角色，越快的能量弛豫发生有害光化学反应的概率就越低。论文首先以植物防晒分子原型芥子酸甲酯作为研究对象，通过光化学合成的方式得到了其顺式构型，并发现了顺式构型在激发态动力学中存在超快的绝热和非绝热弛豫竞争过程，这是在热稳定的反式构型中不存在的。对芥子酸甲酯苯环上对位上的羟基进行取代，发现当羟基被取代为氢原子时，会有新的 $V'(\pi\pi^*)$ 态参与其激发态能量弛豫并大大的降低其能量弛豫效率，表明在设计新的防晒分子时应该避免 $V'(\pi\pi^*)$ 态的参与。最后对芥子酸甲酯碳碳双键上的氢原子进行甲基化，发现氢原子的甲基化可以改变了其激发态能量弛豫方式并能明显的提高其激发态能量弛豫效率，为设计性能更优越的防晒分子提供了一个思路。

上述研究结果具有创新性。

论文研究目标明确，思路清晰，实验方案设计和数据分析合理，结论可信，表明作者具有扎实的基础理论知识和独立从事科研工作的能力，达到博士学位论文的要求。同意答辩，建议授予博士学位。

是否同意组织学位论文答辩 (请在相应栏内划“√”)	<input checked="" type="checkbox"/> 同意答辩	<input type="checkbox"/> 修改后答辩	<input type="checkbox"/> 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%	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%	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%	94
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%	92
总体评价			总分	94.8 ≈ 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： 植物防晒分子激发态动力学研究

作者姓名： 赵西

作者采用飞秒瞬态光谱技术和量子化学理论计算方法从实验和理论两个方面研究了植物防晒分子芥子酸脂(SM)及其衍生物分子的结构、激发态性质、超快能量弛豫效率、光致异构化量子产率和防晒机理。论文选题新颖，具有重要的科学意义和应用前景。

作者研究了具有顺式和反式结构防晒分子 SM 的防护紫外线机理；在防晒分子 SM 的苯环对位上进行了甲氧基和氢原子取代，得到了 p-OMeMS 和 p-HMS 产物分子，探讨了 SM、p-OMeMS 和 p-HMS 的激发态性质和不同取代物的弛豫机理；研究了在 SM 和 p-OMeMS 分子的 C=C 双键上对氢原子进行甲基取代，得到了 8MeMS 和 p-OMe8MeMS 产物，从而极大地提高了光致异构化量子产率和激发态能量弛豫效率。上述研究结果具有明显的创新性和重要的应用价值。

论文研究内容丰富，文献综述全面，逻辑严谨，结论正确，是一篇优秀的博士学位论文。

微小的修改建议：文中存在个别错别字。例如，在摘要的第 1 段，“来至于”应为“来自于”；在摘要及正文中，“弛豫”应该为“弛豫”；建议把“碳碳双键”改为“C=C 双键”或者“碳-碳双键”。类似的问题还可以在论文中找到。建议作者仔细检查并修改。

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