



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 金属化合物的光电子光谱研究

作者姓名 袁勤勤

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%	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%	96
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%	94
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： 金属化合物的光电子光谱研究

作者姓名： 袁勤勤

论文作者采用激光溅射沉积光电子能谱成像和电喷雾磁瓶式电喷雾
谱方法，并结合量子化学理论计算，分别对异双核钒钼羧基配合物 $[\text{VNi}(\text{CO})_n]$
($n=2-6$)，三价金属EDTA配位化合物 $[\text{EDTA}\cdot\text{M}(\text{III})]$ ($\text{M}=\text{Al}, \text{Sc}, \text{V}-\text{Co}$)，二价金属
EDTA配位化合物 $[\text{EDTA}\cdot\text{M}(\text{II})]^{2-}$ ($\text{M}=\text{Ca}, \text{V}-\text{Zn}$) 进行了研究。揭示了它们的
几何结构、化学键、结构生长规律和反应机理等信息，论文选题具有重要意义。

论文方法得当，数据详实，分析严谨，撰写规范，表明作者在本学科
领域查阅了大量相关文献，掌握了扎实的基础理论和专门知识，具备了从事
本学科相关科研工作的能力。袁勤勤同学的论文达到了博士学位论文的水平，
是一篇优秀的博士学位论文，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%	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%	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%	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%	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%	95
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：金属化合物的光电子光谱研究

作者姓名：袁勤勤

金属化合物及其与小分子的相互作用研究具有重要意义。本论文利用光电子速度成象和磁瓶式光电子阱谱实验方法，结合量子化学计算，研究了一系列金属S-氧化物、 α -酮羧酸等小分子的相互作用机制，在几何结构、化学键、结构演化等方面做出了创新性研究成果。

论文研究路线合理，结果分析可靠，数据翔实，说明作者在学科已具有扎实的专业知识，和独立从事科研工作的能力。论文思路清晰，文笔通顺，图文规范，表述清楚，逻辑合理，达到了博士论文水平。

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%	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%	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%	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%	92
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%	92
总体评价			总分	94.3

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：金属化合物的光电子光谱研究

作者姓名：袁勤勤

本论文研究了簇和过渡金属配合物的光电子光谱。作者通过光电子能谱成像和扫描式光电子能谱实验与量子化学计算相结合揭示了不同金属配合物的电子和几何结构以及成键与结构变化的规律，取得了创新性成果。论文选题具有重要理论和现实意义，论文逻辑性强，体现了作者具有独立从事科研工作的能力。在论文写作方面，建议作者注意规范性，比如表格和图应充分交代个别字词重复等。

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%	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	90.5

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： 金属化合物的光电子光谱研究

作者姓名： 袁勤勤

该论文整体学术水平较高，有一定的创新性。选题有较高的学术和实际应用意义，论文写作规范，逻辑性较强。

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%	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： 金属化合物的光电子光谱研究

作者姓名： 袁勤勤

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

研究小分子与金属离子的相互作用有助于理解在均相、多相及生物催化中反应物在金属活性中心上的活化转化机制，具有较高的基础理论意义。

袁勤勤同学利用激光溅射和电喷雾两种团簇产生方法，采用光电子速度成像及光电子能谱分析技术，并结合理论计算，较为深入地研究了以下三个体系：

1. CO 与 VNi 形成的 $[VNi(CO)_n]$ -羰基化合物团簇中 CO 的配位形式与其配位数的关系；
2. EDTA 与三价金属 Al、Sc、V-Co 等形成的络合物的结构特点及其氧化还原性质。研究发现 V 的络合物有较强的还原能力，易于被氧化；
3. EDTA 与二价金属（Ca、Mn、Co、Ni、Cu、Zn 等）形成络合的电子结构。过渡金属对络合物分子轨道的 HOMO 均有贡献。而配位络合及溶剂化效应均对金属离子及其配位络合物的氧化还原活性产生影响。

本论文从分子水平上探讨了金属与配体的相互作用，研究手段先进，研究体系较为系统，得到了很有意义的结果。

附件 7



中国科学院大学
University of Chinese Academy of Sciences

硕士学位论文评阅书

论文题目 旋转弧等离子体催化重整乙醇或柴油制氢研究

作者姓名 刘敦珂

学位类别 工程硕士

学科（专业） 化学工程

研究所（院系） 大连化学物理研究所

中国科学院大学制

硕士学位论文专家评阅意见

评阅意见（包括论文选题的理论意义和应用价值；文献资料的掌握；论文取得的成果及水平；写作规范化、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： 旋转弧等离子体催化重整乙醇或柴油制氢研究

作者姓名： 刘敦珂

本论文^文针对燃料电池所用氢能制备、存储、运输的关键问题，开展旋转弧等离子体催化重整乙醇或柴油制氢研究。论文选题具有较高的应用价值，同时论文取得较高应用价值的成果。乙醇或柴油制氢效率高于传统催化重整方法。重整装置体积小，启动快，燃料适应性强。

论文对文献资料调研充分，研究背景知识掌握充分。行文写作规范，表述准确，逻辑通顺，思路清晰，体现了较好的科研素养。~~建议~~论文中使用模拟分析与试验相结合的研究方法，建议后续研究中对试验条件或~~模拟~~模型精确性上做出改进，提高两者之间的匹配性，同时加强对反应过程机理方面的理论研究。

论文总体评价 (请在相应栏内划“√”)	<input checked="" type="checkbox"/> 优秀	<input type="checkbox"/> 良好	<input type="checkbox"/> 中	<input type="checkbox"/> 差
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"/> 修改以后答辩	<input type="checkbox"/> 不同意答辩	

硕士学位论文专家评阅意见

评阅意见（包括论文选题的理论意义和应用价值；文献资料的掌握；论文取得的成果及水平；写作规范化、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： 旋转弧等离子体催化重整乙醇或柴油制氢研究

作者姓名： 刘敦珂

等离子体重整燃料制氢具有潜在的应用前景，作者在广泛调研和总结文献的基础上，重点开展了旋转弧等离子体催化重整乙醇及柴油重整制氢工作，借助模型模拟，对操作条件和设备条件进行系统研究，得到许多有借鉴意义的结论：(1)设计了旋转弧等离子体重整反应器，并实现了乙醇与柴油的重整制氢，燃料转化率均可大于 95%。(2)系统考虑了氧碳比、水碳比、电源频率和电极截面积对重整制氢的影响，确定了较优的操作条件。(3)由于等离子体重整对氢气的选择性相对弱，通过结合催化重整反应器，进一步提高氢气的选择性。

论文写作规范，表述清晰，数据收集较齐备，体现出作者对相关学科基础知识的掌握较充分，具有一定的科研潜质和独立从事研究工作的能力。

尚存在问题有：论文模拟结果与实验差距较大，应该深入分析存在的原因，并提出解决方案。

论文总体评价 (请在相应栏内划“√”)	<input type="checkbox"/> 优秀	<input checked="" type="checkbox"/> 良好	<input type="checkbox"/> 中	<input type="checkbox"/> 差
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"/> 修改以后答辩	<input type="checkbox"/> 不同意答辩	

硕士学位论文专家评阅意见

评阅意见（包括论文选题的理论意义和应用价值；文献资料的掌握；论文取得的成果及水平；写作规范化、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： 旋转弧等离子体催化重整乙醇或柴油制氢研究

作者姓名： 刘敦珂

聚合物电解质膜燃料电池（PEMFCs）通常采用氢气为燃料，其能量转化效率高，环境污染小，在诸多领域应用前景广阔。氢气燃料的制备、存储、运输对 PEMFCs 应用至关重要。目前燃料电池领域主流的氢气制备技术有水电解、传统催化重整、等离子体重整等。与催化重整相比，等离子体重整具有启动快、装置体积小、原料来源广等优点，有望成为氢燃料现场制备的重要技术途径。该论文以氢气为目标产物，采用模拟分析和实验研究了旋转弧等离子体结合催化重整乙醇（柴油）制氢反应设备结构和工艺参数的影响规律，得到的结果具有一定的创新性，如论文系统探究了电极截面积、电源频率、氧碳比、水碳比等对旋转弧等离子体重整乙醇（柴油）制氢反应的影响规律，并详细分析了产生响应规律的原因。这些结果为未来开发新的制氢技术提供了基础数据和思路。

论文写作规范，数据详实，论证严谨，逻辑性较强，体现出作者扎实的理论基础以及良好的科研能力，建议参加论文答辩。

论文不足之处：

1. 论文模拟结果与实验结果仍存有一定差距，模拟工作应该不仅局限于热力学模拟，虽然热力学模拟对优化工艺参数至关重要，但是系统设计应该是热力学和动力学模拟相结合，这样更有实用价值；
2. 等离子体催化重整乙醇（柴油）制氢反应条件对产物组成的影响应该进一步从键能和等离子体能量匹配角度深入挖掘，这对于优化等离子体重整具有重要意义。

论文总体评价 (请在相应栏内划“√”)	<input checked="" type="checkbox"/> 优秀	<input type="checkbox"/> 良好	<input type="checkbox"/> 中	<input type="checkbox"/> 差
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"/> 修改以后答辩	<input type="checkbox"/> 不同意答辩	