

附件 6



中国科学院大学

University of Chinese Academy of Sciences

博士毕业论文评阅书

论文题目 基于平均力势模拟研究可卡因相关结合过程

作者姓名 张玉新

毕业类别 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%	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%	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%	5
总体评价			总分	83

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。

对毕业论文的学术评语：（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：基于平均力势模拟研究可卡因相关结合过程

作者姓名：张玉新

该论文对可卡因进行了相关理论研究，全文学术水平较高，属于科学前沿课题，有很好的创新性，选题背景实用性论证充分，全文撰写规范。

存在的主要问题是如文章撰写较口语化，希望尽量用规范语言，有的语句不够通顺，还需认真加以梳理。摘要不够简洁，中英文对照不一致，一些关键术语中的英文应有对应介绍，全文背景介绍不够完整，同时，作为学位论文，应具有较强的整体性。全文同一物理量需要有效数字相一致，公式同一个量不应用不同写法，每章的结论不够多引入，不描述计算结果，未进行物理图像分析。希望找到实验数据，增强说服力。

建议修改不足，同意答辩。

是否同意组织毕业论文答辩

（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%	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%	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	92.5

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。

对毕业论文的学术评语：（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：基于平均力势模拟研究可卡因相关结合过程

作者姓名：张玉新

可卡因是一种成瘾性和危害性超强的物质。研究高效可卡因代谢酶有望发展为有效治疗可卡因成瘾的药剂。张玉新同学的博士论文《基于平均力势模拟研究可卡因相关结合过程》通过分子动力学模拟和平均力势模拟方法，研究多巴胺转运体和可卡因酶对正交型可卡因和多巴胺的结合过程，发现了两种蛋白（酶）对正交型可卡因的不同结合方式。其选题新颖，结果具有创新性，且具有重要的理论和实际应用意义。

不足或建议：

1. 论文的排版，语言等方面需要改进（如 P36, P37）
2. 每章（3-4）的讨论不充分，结果过于简单。
3. 缺少对于研究内容的总结总结，展望，以及提供给后续研究者的工作建议。

是否同意组织毕业论文答辩

（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%	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%	92
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%	90
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。

对毕业论文的学术评语：（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： 基于平均力势模拟研究可卡因相关结合过程

作者姓名： 张玉新

论文作者采用平均力势（场）理论方法研究了多巴胺转运体分别与多巴胺、负型可卡因、正型可卡因结合的自由能和结合强度；采用分子动力学和平均力势（场）理论方法计算了可卡因酯酶与正型/负型可卡因结合的自由能，计算了能垒高度，分析了可卡因酯酶与正型/负型可卡因结合过程的差异。由于可卡因酯酶是一种高效代谢可卡因的天然酶，因此作者的研究工作具有重要的学术价值和应用背景。

论文选题新颖。写作较规范。达到了博士学位论文的水平要求。

论文的不足之处：缺少对全文的“总结与展望”内容，建议作者予以补充。

是否同意组织毕业论文答辩
（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%	35
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%	8
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	88

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。

对毕业论文的学术评语：（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： 基于平均力势模拟研究可卡因相关结合过程

作者姓名： 张玉新

可卡因是目前世界上泛滥最为严重的毒品之一。通过对其代谢过程的研究，可以为对可卡因依赖性的治疗提供重要的理论依据。论文选题具有重要的科学意义和应用价值。该论文中，作者利用分子动力学模拟的方法，从理论上研究了可卡因酯酶与正型可卡因的结合等过程，取得了如下的创新成果：

1、通过平均力势模拟方法计算，其结合自由能曲线，发现多巴胺转运体与多巴胺的结合强度高于其与可卡因的结合强度。多巴胺转运体与多巴胺以及负型可卡因结合过程无明显能垒，而正型可卡因的结合过程中存在一个 5.6kcal/mol 的显著自由能垒。

2、通过分子动力学模拟和平均力势模拟方法，计算可卡因酯酶与正型可卡因的结合自由能曲线，并与负型可卡因相比较，发现可卡因酯酶与正型可卡因的结合过程中存在一个约为 2 kcal/mol 的显著自由能垒，该能垒与分子在结合口袋内的旋转有关。两种可卡因的结合自由能相差仅为 0.2kcal/mol，与实验结果相吻合。

论文写作符合规范，文献综述全面，结论正确，具有一定的创新性。不足之处在于，论文中更多的关注了正型可卡因，而对影响更大的负型可卡因讨论不够，而且理论研究也仅限于其结合过程，研究还有待进一步深入。

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。

是否同意组织毕业论文答辩 (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
评阅人姓名	王 1. 2	王 1. 2	王 1. 2

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%	85
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	85
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	84.5

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。

本论文中存在的问题：1. 摘要部分背景内容介绍过多，显得不够精炼。2. 论文目录页码与正文部分不对应。

是否同意组织毕业论文答辩 (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	王 华	王 华	王 华	王 华