



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 几个含能材料体系的量子化学以及分子力学理论计算研究

作者姓名 刘润泽

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%	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%	91
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%	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%	92
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：几个含能材料体系的量子化学以及分子力学理论计算研究

作者姓名：刘润泽

刘润泽同学的博士学位论文选取了四个含能材料体系作为研究对象，利用量子理论计算方法，从反应机理上研究了这些体系中存在的问题或被错误理解的地方。具体地说，对一类芳基五唑分子的生成机理深入分析，提出了一个更高效合成方案；对一类四唑分子的N-氯化过程进行分析，理清了这类分子的氯化难易程度的变化；确定了一例检测TNP的荧光探针分子的检测机制；通过对含能材料氧化镁的生成机理研究，更正了之前的错误认识。

该论文选题思路明确，工作量饱满，取得了较好的研究成果。论文书写规范，结构完整。论文达到了理学博士学位论文的学术水平。建议参加答辩。

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%	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%	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%	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	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：几个含能材料体系的量子化学以及分子力学理论计算研究

作者姓名：刘润泽

该论文利用量子化学以及分子力学方法对若干含能材料、激光探针等体系进行了详细的研究，对分子的生成机理，激发态性质进行了成功地解释。论文选题新颖，研究成果具有创新性。论文撰写符合规范，达到了博士学位论文的要求，建议按时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%	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%	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%	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%	8
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：**几个含能材料体系的量子化学以及分子力学理论计算研究

**作者姓名：**刘润泽

新型含能材料的开发是化学的重要研究领域，对其合成和反应机理的研究对含能材料的设计与开发具有重要的指导意义。本论文中，作者对多个重要的含能材料合成反应的机理，以及荧光探针分子对含能材料的分析检测机理进行了理论研究。论文选题具有重要的科学价值。

本论文中，作者利用量子化学计算方法，研究了芳基五唑的合成反应、多唑分子氮氧化反应的反应以及荧光探针分子 2-(4,5-双(4-氯苯基)-咪唑基)-4-氯苯酚（HPICI）检测爆炸物分子 2,4,6-三硝基苯酚（TNP）的检测机理，取得了如下的创新成果：

1. 研究结果表面芳基五唑的生成过程不是一个直接的环加成过程，而是会形成三种构象异构的中间产物。其中 trans-cis 结构是得到芳基五唑产物的核心中间体，并且 trans-cis 结构的成环与脱 N<sub>2</sub> 二者竞争关系影响了芳基五唑的产率。

2. 对多唑分子氮氧化反应的研究结果表明，硝基四唑阴离子五元环上的氮原子具有氧化选择性，将具有吸电子性的硝基换做 H 和推电子的氨基时，四唑环更容易发生 N-氧化过程，但氮氧化位点选择性减弱。多唑离子的氮氧化难易程度随环上 N 原子数的增多而加大。

3. 荧光探针分子 HPICI 与 TNP 分子之间，分子间相互作用的方式为  $\pi$ - $\pi$  堆叠和分子间氢键共存。发现 S<sub>1</sub> 电子激发态对应于分子间电荷迁移态且为荧光暗态，HPICI 检测 TNP 分子的荧光猝灭行为属于光致电子迁移(PET)机理。

论文内容丰富，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，论文中对氮氧化反应与氮原子电荷性质之间关系的研究，还应进一步拓展到其他多氮含能材料中，论文中还存在一些笔误和表述不够严谨的地方。

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%	93
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%	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	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：几个含能材料体系的量子化学以及分子力学理论计算研究

作者姓名：刘润泽

该论文应用理论计算方法对若干含能材料进行了研究。研究了含能材料的合成反应路径以及氧化过程机理，研究了荧光探针分子检测爆炸物分子 TNP 的检测机理。选题瞄准国家战略需求，具有重要的学术和潜在应用价值。

该论文在以下几个部分获得创新性成果：首先利用密度泛函理论计算了芳基五唑分子的合成反应机理，通过计算不同反应路线证实 trans-cis 结构是反应过程核心中间体，为合成芳基五唑提供了研究思路。其次计算了硝基四唑离子与 OXONE 发生 N-氧化过程的反应机理，结果表明硝基四唑阴离子的五元环上的氮原子具有氧化选择性。最后利用含时密度泛函理论研究了荧光探针分子 HPICI 检测爆炸物分子 TNP 的检测机理。表明 HPICI 分子与 TNP 形成  $\pi-\pi$  堆叠和分子间氢键复合物，其 S1 激发态对应于分子间电荷迁移态，能引起荧光猝灭。该检测机理属于光致电子迁移机理。论文工作的特色在于利用理论计算，探讨了系列反应机理及检测机理，为进一步实验提供了理论支撑。

论文写作规范，逻辑性强，对文献掌握较好，是一篇不错的科研论文。

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%	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%	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%	33
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%	8
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：几个含能材料体系的量子化学以及分子力学理论计算研究

作者姓名：刘润泽

本文利用理论方法计算了芳香五唑、硝基五唑、爆炸物TMP检测及材料降解的机理，对于含能材料的合成反应机理有一定的意义。论文计算了多个体系的基态热反应，激发态以及材料的分子动力学性质，涉及的面比较宽，但研究的都不够深入。论文中理论与实验结合的不够紧密；建议作者给出所有图表中采用的计算方法与基组；论文引言部分过于简略，请适当补充。

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