



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 激发态质子耦合电子转移体系的动力学理论研究

作者姓名 任广华

学位类别 理学博士

学科（专业） 物理化学

研究所（院系） 中科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%	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%	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%	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%	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	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：**激发态质子耦合电子转移体系的动力学理论研究

**作者姓名：**任广华

复杂分子体系的光化学与光物理过程是分子反应动力学领域重要的研究内容。本论文中，作者利用理论计算方法研究了多个体系在激发态下的动力学行为。论文选题具有重要的科学价值。

作者利用密度泛函和含时密度泛函理论计算方法，结合吸收和发射光谱实验数据，研究了光酸分子 4-([2,2'-联吡啶]-4-基)苯酚 (bpy-phenol)、苯并咪唑苯酚衍生物和氧苯酮的激发态氢键、电子/质子转移以及它们耦合转移的动力学机理，取得了如下的创新成果：

1、bpy-phenol 分子被光激发后，和 F<sup>-</sup>离子之间发生一个超快的激发态质子耦合电子转移后，可以发生第二步的激发态质子转移过程，生成一个具有两性离子特性的 bpy-phenol 同分异构体。

2、设计出了一种可以在激发态利用电荷转移驱动双质子转移的分子架构。通过在电子激发态上完成质子和电子的共同转移，提高光能转化效率。

3、氧苯酮在 S<sub>2</sub> 电子态通过电荷转移的诱导，可以发生无能垒的激发态分子内质子转移反应；在 S<sub>1</sub> 电子态时，水的氢键网络结构可以诱导氧苯酮在 S<sub>1</sub> 态将它的质子传递给水溶剂，生成去质子化的氧苯酮阴离子和 Eigen 结构的水合氢离子。

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，论文中部分理论研究的结果，还需要进一步的实验验证，论文中还存在少量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）
	<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%	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%	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。

电子激发态是光物理、光化学过程中的一种特有特征，因此分子激发态动力学研究成为目前国际上研究的热点和前沿。本文主要利用密度泛函和含时密度泛函理论探究了三个体系在激发态下的氢键、电子/质子转移以及它们耦合转移的动力学行为。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) bpy-phenol 和  $F^-$  离子之间发生超快的激发态质子耦合电子转移之后，仍然可以跟着发生另一个激发态质子转移过程，从而生成一个具有两性离子特性的 bpy-phenol 同分异构体。研究表明，激发态质子耦合电子转移反应可以用来产生两性离子特性的材料。(2) 为了提高人工光合作用的效率，结合前人的研究工作，设计了一种可以在激发态利用电荷转移驱动双质子转移的分子架构。这种反应模式可以提高光能利用率的原因在于，质子和电子可以同在激发态完成全部转移，而不需要淬灭回基态继续反应。双质子转移延长了常规的单质子转移的范围，有利于设计出更好的人工光合作用模型。(3) 氧苯酮之所以可以起到防晒作用，是因为它的激发态分子内质子转移反应促进了激发态和基态之间的内转换速率。理论计算发现，氧苯酮在  $S_2$  态通过电荷转移的诱导，可以发生无势垒的激发态分子内质子转移反应，并且不依赖于溶剂特性；在  $S_1$  态时，水的氢键网络结构可以诱导氧苯酮在  $S_1$  态将它的质子传递给水溶剂，生成一个去质子化的氧苯酮阴离子和 Eigen 结构的水合氢离子。该发现补充了氧苯酮在激发态的反应通道，并且证明了水溶液环境可以破坏其光防护循环机理。

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“√”)

☒ 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%	93
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%	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%	93
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	93
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	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： 激发态质子耦合电子转移体系的动力学理论研究

作者姓名： 任广华

作者采用密度泛函理论并结合少量的光谱实验数据研究了激发态分子的质子耦合电子转移特性。论文选题新颖，具有重要的学术价值和应用背景。

作者的研究工作可概括为三个方面：1) 研究了光酸分子 bpy-phenol 的激发态电荷转移和发射荧光机理，发现了具有双性离子特性的 bpy-pheno 同分异构体，分析了激发态质子耦合电子转移反应机理。2) 研究了激发态电荷转移驱动双质子转移反应机理，探讨了激发态质子和电子以及双质子转移特性。3) 研究了氧苯酮（防晒霜）分子激发态质子转移反应和光防护机理。在上述研究工作中，作者发现了一些新的光物理和光化学现象及其机理，取得了一些具有创新性的研究成果。

论文内容丰富，文献综述全面。达到了博士学位论文的水平要求。

论文存在的微小问题：1) 语言表述不够精炼，需要进一步提炼（包括摘要、引言和致谢等）；2) 论文排版需要更规范一些（如，公式编号前面的“...”号可以删除）。

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%	94
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%	93
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：**激发态质子耦合电子转移体系的动力学理论研究**

作者姓名：任广华

该论文应用密度泛函与含时密度泛函理论的计算方法，以及吸收与发射光谱实验手段，研究了系列体系在激发态氢键、电子/质子转移以及耦合转移的动力学行为。选题瞄准国际研究前沿，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：首先研究了 bpy-phenol 和 F-离子之间产生的双性离子特性分子，可以用来构建双性离子特性的材料。其次研究了在激发态利用电荷转移驱动双质子转移的分子构架，有利于设计出更好的人工光合作用模型体系。最后研究了氧苯同防晒霜分子的光防护机理，并指出了其缺陷，发现水溶液环境可以破坏其光防护循环机理。为设计更高效安全的防晒霜提供了理论指导。论文工作的特色在于理论计算与实验的高度契合，同时为进一步实验设计提供了理论指导。

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%	94
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%	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%	91
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： 激发态质子耦合电子转移体系的动力学理论研究

作者姓名： 任广华

任广华同学的博士学位论文选取了有机分子的电子激发态动力学为研究对象，利用密度泛函和含时密度泛函的理论计算方法，以及微量吸收和发射光谱实验方法，研究了三个分子体系，在激发态下的氢键、电子/质子转移以及它们耦合转移的动力学行为。校正了byp-phenol(分子体系的一个光谱归属问题，设计了一个可促进双质子转移的分子架构，揭示了防晒霜分子苯苯酮的光防护机理的一个潜在问题。

该论文选题思路明确，工作量丰满，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