



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 基于 DFT/TDDFT 理论对于含能材料荧光探针检测机理的研究

作者姓名 吕美横

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%	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%	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%	9
总体评价			总分	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：基于DFT/MDPFT理论对合能材料激光探针检测机理的研究

作者姓名：陈楠

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

吕美横博士论文评审意见（导师韩克利，刘建勇）

“基于 DFT/TDDFT 理论对于含能材料荧光探针检测机理的研究”

2019-03-30

含能材料的快速高效检测对于公众安全，反恐，环境保护等具有重要的意义。由于荧光探针具有高灵敏度、响应速度快等诸多优势，引起了研究者的广泛关注。对于荧光探针传感机理的探索，是发展新型高效荧光探针的关键。论文选题具有重要科学意义和应用价值。

论文以密度泛函和含时密度泛函理论为基础，分别对 TNT 和 TNP 的检测常见的荧光探针做了机理探索。在 TNT 的检测中，作者发现 PTBE 荧光探针是通过与 TNT 分子中苯环形成 $\pi - \pi$ 堆积而进行结合的传感检测机理。而在 PO 分子与 TNT 的结合过程中存在体系的局部激发态和电荷转移态之间存在能级交叉现象。在 TNP 的检测中，作者发现三吡啶系列探针中分子内构型扭转对体系激发过程造成的影响是导致该系列探针的电子光谱差异的原因。上述的荧光传感机理的研究为新的传感器的设计提供了理论基础。

上述研究结果具有创新性。

论文研究目标明确，思路清晰，实验数据分析合理，结论可信，创新性强。表明作者具有扎实的基础理论知识和专业知识，具有独立科学研究工作的能力，达到了博士论文学位的要求。同意答辩，建议授予博士学位。

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%	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%	91
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：基于 DFT/TDDFT 理论对于含能材料荧光探针检测

作者姓名：吕美横 机理的研究

荧光探针传感机理研究为深入理解探针检测机理提供帮助，具有很好的学术价值。本论文采用理论计算方法，研究了三类荧光探针检测含能化合物的传感机理，纠正了实验文献对于检测机理的错误推论，为设计高性能荧光探针提供了理论基础。

论文写作符合学术规范，行文逻辑性强，体现了论文作者较好的学术水平，同意该论文的学位答辩！

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%	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%	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%	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%	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%	90
总体评价			总分	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：基于 DFT/TDDFT 理论对于含能材料荧光探针检测机理的研究
作者姓名：吕美横

发展快速高效检测含能材料的方法对于国家安全、公众健康和环境保护都具有十分重要意义。

论文作者使用含时密度泛函理论方法对有机小分子荧光探针 PTBE 和 PO 检测三硝基甲苯 TNT、以及三吡啶系列荧光探针检测三硝基苯酚 TNP 的传感检测机制进行了系统研究。发现：荧光探针 PTBE 与三硝基甲苯 TNT 通过 PTBE 的茚环骨架与 TNT 的苯环间的 π - π 堆积作用进行结合，探针的荧光淬灭属于光致电子转移过程；对于荧光探针 PO 检测三硝基甲苯 TNT 体系和三吡啶系列荧光探针检测三硝基苯酚 TNP 体系，其传感检测机理均为 PET 机理。这些研究结果对高效设计高性能荧光探针具有重要参考价值。

论文写作规范，层次清楚，达到了博士论文要求。

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%	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%	36
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%	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：基于DFT/TDDFT理论对于含能材料荧光探针
作者姓名：吕美横 检测机理的研究

吕美横同学在博士工作期间，采用DFT相关的较高精度的理论计算方法，研究了PTBE荧光探针和PO荧光探针对TNT体系的传感检测过程以及采用三吡啶系列探针对TNP的传感检测过程。

理论研究结果揭示了荧光探针分子与含能材料底物分子的结合方式及荧光传感机理，为设计高性能荧光探针提供了理论基础。

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: 基于DFT/TDDFT理论对于含能材料荧光探针
作者姓名: 吕美横 检测机理的研究

该博士学位论文用DFT/TDDFT理论对若干含能材料
荧光探针的检测机理进行了研究。选题具有重要的理
论研究意义与实际应用价值, 研究成果具有创新性, 发现
了不同于文献报道的机理。论文撰写符合规范, 达到了
博士学位论文的要求, 建议如期进行答辩。

仅建议进行部分文字格式修改, 如部分图不清楚如图2.1;
第4章应给出探针分子结构。

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