

附件 6



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 碳氢化合物高温燃烧裂解反应机理研究

作者姓名 刘雅兰

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%	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%	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%	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：**碳氢化合物高温燃烧裂解反应机理研究

**作者姓名：**刘雅兰

燃烧过程中微观反应动力学是分子反应动力学领域重要的研究方向。本论文中，作者对甲基环己烷等多种重要燃料体系的反应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和基于反应性力场的分子动力学模拟方法，研究了甲基环己烷的高温裂解以及高温氧化反应过程、NO 对甲烷燃烧过程反应机理的影响，以及正庚烷与乙醇混合燃烧的反应机理，取得了如下的创新成果：

1. 研究结果对甲基环己烷裂解的初始反应机理，重要产物的分布以及其涉及的中间反应机理进行了详细的描述。获得了甲基环己烷裂解的表现活化能。

2. 通过对甲基环己烷在不同条件下的氧化机理的研究，构建了甲基环己烷氧化的流程图。得出了甲基环己烷在不同等量比条件下氧化的表现活化能。

3. 对于 NO 对甲烷氧化机理影响的研究结果表明，NO 对甲烷氧化存在双重影响。

4. 正庚烷和乙醇混合燃烧过程中，正庚烷主要通过单分子解离反应，乙醇主要通过 OH 的夺氢反应来消耗的。氧化的主要产物为乙烯，甲醛，一氧化碳，二氧化碳，水，增加乙醇的混合比可以减少这些物种的生成，但是作用的机理不同。

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，论文中碳氢化合物的燃烧裂解是在高温下模拟的，还应进一步拓展到中低温条件下。

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

附件 6



**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 碳氢化合物高温燃烧裂解反应机理研究

作者姓名 刘雅兰

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%	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%	93
总体评价			总分	92

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：碳氢化合物高温燃烧裂解反应机理研究

作者姓名：刘雅兰

作者采用分子反应力场和量子化学理论计算方法研究了碳氢化合物高温燃烧裂解反应机理。论文选题新颖，具有重要的科学价值和应用背景。

作者分析了甲基环己烷的高温燃烧裂解及氧化反应过程与机理，描绘了主要产物分布和所涉及的中间反应过程，分别计算了甲基环己烷高温燃烧裂解和氧化的表观活化能；探讨了 NO 对甲烷燃烧反应机理的影响，理论计算结果表明 NO 对甲烷氧化有着双重影响；研究了正庚烷与乙醇混合燃烧反应机理，给出主要产物分布和中间反应过程。这些研究工作对深入研究碳氢化合物高温燃烧反应机理和提高能源利用率有着积极的促进作用。研究结果具有一定的创新性。

作者阅读了大量相关的文献资料。论文写作规范，达到了博士学位论文的水平要求，是一篇优秀的博士学位论文。

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

附件 6



**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 碳氢化合物高温燃烧裂解反应机理研究

作者姓名 刘雅兰

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%	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%	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%	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	89

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：碳氢化合物高温燃烧裂解反应机理研究

作者姓名：刘雅兰

论文作者采用反应力场的方法对甲基环己烷的高温裂解和氧化机理、NO对甲烷氧化的影响及正庚烷、乙醇混合燃烧的反应机理进行了研究，对于理解复杂的燃烧过程有一定的意义。论文的内容与实验研究结合的不够紧密，在理论模型上有创新。由于受方法所限，在计算的精度以及时间的尺度方面需要进一步的提高。论文写作规范，逻辑性较强，论文3-4章论述较详细，5-6章略显单薄。

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

附件 6



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 碳氢化合物高温燃烧裂解反应机理研究

作者姓名 刘雅兰

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%	8
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%	12
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%	7
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：碳氢化合物高温燃烧裂解反应机理研究

作者姓名：刘雅兰

刘雅兰同学博士期间运用分子动力学计算方法系统研究了燃烧中甲基环乙烷的高温裂解及氧化机理，一氧化碳对甲烷氧化过程的影响及正庚烷和乙醇混合燃烧的微观反应机理。对这一系列燃烧过程中的微观动力学过程给出了较为清晰的图景，对主要自由基的产生及消耗进行了较为深入的研究和系统的阐述。博士论文内容详实，条理清晰的阐述了理论方法的发展、应用及重要的计算结果。

该研究不仅在燃烧反应动力学机理中有重要意义，在实际应用中也有助于理解燃烧过程，使燃烧过程更高效、洁净。论文中的一些用词值得商榷，例如“等量比”，“喷射反应搅拌器”，建议使用更常用的表述。文中公式编辑及排版，如P13的(2.39)，P14的(2.46)，需要修改。文中第三章及第四章单位需统一，如都用kJ/mol或Kcal/mol。论文书角等处需校正，如P36，400ps应写成400 ps。

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

附件 6



**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 碳氢化合物高温燃烧裂解反应机理研究

作者姓名 刘雅兰

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%	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%	95
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%	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：碳氢化合物高温燃烧裂解反应机理研究

作者姓名：刘雅兰

研究燃料在燃烧过程中的微观反应动力学机理对提高效率、降低污染等具有重要的意义。本文选取甲基环己烷为研究对象，利用量子化学计算和反应力场模拟方法，深入系统研究了其高温裂解和高温氧化的反应过程，取得了一系列创新性研究成果。论文同时还研究了NO对甲烷燃烧过程的影响机制以及正庚烷与乙醇混合燃烧的反应机理。

论文理论方法和研究路线合理，结果分析可靠，说明作者在本学科已具有扎实的坚实基础和独立从事科研工作的能力，论文思路清晰，文笔通顺，表述清楚，数据翔实，逻辑合理，图文规范达到了硕士论文的水平。

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