

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%	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%	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	93

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）

金属催化剂的电子和几何结构对其活性和选择性影响显著。论文基于铂簇模型催化剂体系设计和研究，揭示载体和助剂对贵金属催化剂表面催化反应行为的影响，开发具有优异性能的催化剂，这一研究具有重要理论和实际意义。

论文首先制备了 Ru/TiO_2 催化剂。发现载体晶型对 Ru/TiO_2 上 CO_2 加氢反应选择性影响显著。首次证明了反应条件下电子效应对催化剂性能的调变。应用这一机理实现了 Rh 、 Ni 基催化剂上 CO_2 加氢选择性控制及涉氢反应 CO 选择氧化反应性能的提升。考察了氢化 TiO_2 为载体制备的 Ru/TiO_2 在 CO 选择甲烷化反应中的性能。研究发现 H-TiO_2 载体至 Ru 的电子转移能够促进 CO 解离吸附，金属-载体界面处 Ru 位上的吸附 CO 不参与甲烷转化，并能够抑制 CO_2 转化降低副反应。 H-TiO_2 对 Pt 族贵金属催化剂电子结构调变具有普适性。

第二，研究 Zn 助剂对 $\text{Pt/Al}_2\text{O}_3$ 催化剂电子和几何效应。发现 Zn 助剂优先与台阶位不饱和 Pt 结合易于电子转移， Zn 助剂能够降低载体 L 酸性，有助于抑制积碳中间体乙川的形成，从而减缓积碳速率，提高了催化剂的稳定性。催化剂在乙烷脱氢反应中表现出优异的催化性能。

第三，以 ZnO 为载体制备 PdZn 金属间化合物催化剂，研究 Zn 对 Pd 的电子和几何效应的影响。发现 PdZn 金属间化合物会形成 Pd-Zn-Pd 的单原子结构，并且 Zn 会向 Pd 转移电子。甲醇水汽重整反应中，反应物和中间体适中的吸附活化强度，使各物种能够竞争吸附，进而实现高活性和高 CO_2 选择性。

论文选题先进，文献综述全面，实验方案合理，研究内容丰富，写作符合规范，逻辑清晰，图表正确，数据可信，达到了博士论文要求，同意进行博士论文答辩。

<p>是否同意组织学位论文答辩</p> <p>（请在相应栏内划“√”）</p>	<p><input checked="" type="checkbox"/> 同意答辩</p> <p><input type="checkbox"/> 修改后答辩（论文需通过小的修改后答辩）</p> <p><input type="checkbox"/> 修改后评阅（论文需通过大的修改后再评阅）</p> <p><input type="checkbox"/> 不同意答辩</p>
---	--

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%	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%	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	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 90 分为良好；大于等于 60 分小于 75 分为中；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）

贵金属催化剂在化学工业领域占有重要地位。本论文旨在开发高效贵金属催化剂，同时深入研究催化剂的构效关系，论文选题具有重要的应用价值和理论意义。

论文重点研究了 Ru、Rh、Pt、Pd 等几类贵金属催化剂，考察了 CO₂ 加氢、CO 甲烷化、乙烷脱氢等反应，主要取得以下研究成果：

- 1、通过改变 TiO₂ 载体的晶型和 Ru 负载量可以实现 CO₂ 加氢产物的调变，通过各种表征手段发现氢溢流现象和金属-载体之间的电子传递是加氢产物选择性改变的微观本质因素；
- 2、开发出高性能的 Ru 基 CO 甲烷化催化剂。借助原位红外表征技术和 DFT 理论计算发现，TiO₂ 载体对 Ru 的电子转移增加了 Ru 的电子密度，促进了 CO 在 Ru 上解离吸附，增强了 CO 在金属-载体界面位置上的吸附强度，提高了催化性能；
- 3、制备出高稳定性的 PtZn_x/Al₂O₃ 乙烷脱氢催化剂，通过多种原位表征技术发现 Zn 能够在几何和电子两个方面改善 Pt 活性中心的催化性能，为高活性、高稳定性催化剂的开发提供了理论依据；
- 4、应用吸附量热和 FT-IR 表征考察了电子和几何效应对反应物和中间体吸附与活化的影响，并与反应性进行了关联。研究表明反应物和中间体在 PdZn 金属间化合物上具有相当的、适中的吸附强度，从而实现了催化剂的高活性和高选择性。

上述结果具有创新性。

论文工作量大，数据详实，写作规范，论述有力，达到了博士论文要求，同意进行答辩。

<p>是否同意组织学位论文答辩</p> <p>（请在相应栏内划“√”）</p>	<p><input checked="" type="checkbox"/> 同意答辩</p> <p><input type="checkbox"/> 修改后答辩（论文需通过小的修改后答辩）</p> <p><input type="checkbox"/> 修改后评阅（论文需通过大的修改后再评阅）</p> <p><input type="checkbox"/> 不同意答辩</p>
---	--

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 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%	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%	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	91.5

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 90 分为良好；大于等于 60 分小于 75 分为中；小于 60 分为差。

对学位论文的学术评语：

负载型贵金属催化剂被广泛用于石油化工、节能减排、洁净能源等领域，开发高性能的贵金属催化剂具有重要的研究价值。论文选择铂族贵金属催化剂的电子和几何效应调控及涉氢反应性能作为研究内容，具有重要的学术价值和潜在的应用前景。

论文以载体和助剂调控贵金属催化剂性能，结合多种原位催化表征技术揭示电子和几何效应对催化剂吸附、反应行为影响，设计开发具有优异性能（活性、选择性和稳定性）的催化剂，得到如下主要研究结果：（1）通过改变载体的晶型或 anatase 上 Ru 的负载量可以实现 Ru/TiO₂ 上 CO₂ 加氢产物（CO 或 CH₄）高选择性的调变。通过原位红外光谱、近常压 XPS 等原位表征技术和 DFT 理论计算相结合，首次证明反应条件下的氢溢流及其引起的 Ru 到 TiO₂ 载体间的电子转移能够改变反应中间体 CO 的吸附强度，进而引起不同的产物选择性。（2）以氢化的氧化钛（H-TiO₂）为载体，制备粒径尺寸一致的 Ru/TiO₂ 和 Ru/H-TiO₂ 催化剂，通过选择合适的氢化温度，可以显著提高催化剂的 CO 选择甲烷化反应性能。借助原位红外表征技术和 DFT 理论计算，发现催化剂反应性能的提升与氢化 TiO₂ 对 Ru 的电子转移有关。（3）以 ZnO 为载体，制备了一系列不同 Zn 含量的 PtZn_x/Al₂O₃ 催化剂，发现 Zn 修饰的 Pt/Al₂O₃ 催化剂能够在 70 h 的连续反应中，实现 0.003 h⁻¹ 超低失活速率和 95% 以上的乙烯选择性，是目前报道的最稳定催化剂。多种原位表征技术揭示了 Zn 能够优先覆盖 Pt/Al₂O₃ 催化剂上 Pt 纳米粒子的台阶位（step sites），进而抑制了 Pt 粒子的烧结。（4）发现 PdZn 金属间化合物中会形成 Pd-Zn-Pd 的单原子结构，并且 Zn 会向 Pd 转移电子。

上述研究结果具有创新性。

论文达到了博士学位论文的要求，同意参加答辩。

不足之处：Figure 3.4 和 Figure 3.21 中的 spectra 应为 spectra，第五章和第六章中的 DRIFTS 与 DRIFT spectra 应该统一。

<p>是否同意组织学位论文答辩</p> <p>（请在相应栏内划“√”）</p>	<p><input type="checkbox"/> √ 同意答辩</p> <p><input type="checkbox"/> 修改后答辩（论文需通过小的修改后答辩）</p> <p><input type="checkbox"/> 修改后评阅（论文需通过大的修改后再评阅）</p> <p><input type="checkbox"/> 不同意答辩</p>
---	---

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%	37
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%	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	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 90 分为良好；大于等于 60 分小于 75 分为中；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）

（3）

<p>是否同意组织学位论文答辩</p> <p>（请在相应栏内划“√”）</p>	<p><input checked="" type="checkbox"/>同意答辩</p> <p><input type="checkbox"/>修改后答辩（论文需通过小的修改后答辩）</p> <p><input type="checkbox"/>修改后评阅（论文需通过大的修改后再评阅）</p> <p><input type="checkbox"/>不同意答辩</p>
---	--

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%	85
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%	80
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 90 分为良好；大于等于 60 分小于 75 分为中；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）

负载型贵金属催化剂广泛应用于石油化工、环境保护，能源转化和精细化学品合成等领域。理解和认识负载型贵金属催化剂中的电子和几何效应是设计和开发高性能催化剂的前体。该学位论文以载体和助剂调控负载型贵金属催化剂性能的选题不仅具有重要的理论意义，还有极其重要的应用价值。

该学位论文的创新点包括：1）以锐钛矿和金红石晶型的 TiO_2 为载体制备了负载型 Ru 基催化剂，发现通过改变 TiO_2 的晶型或锐钛矿 TiO_2 上 Ru 的担载量可以实现 CO_2 加氢产物的高选择性调变，并通过表征证明了反应条件下的氢溢流及其引起的金属与载体间的电子转移改变了反应中间体的吸附强度，进而改变了产物的选择性；2）以氢化的 TiO_2 为载体制备了负载型的 Ru 基催化剂，发现通过选择合适的氢化温度，可以显著提高催化剂的 CO 选择性甲烷化性能，其氢能提升与氢化的 TiO_2 和 Ru 的之间电子转移有关；3）制备了系列 Zn 修饰的 Pt/ Al_2O_3 催化剂，发现 Zn 修饰的 Pt/ Al_2O_3 催化剂在乙烷脱氢反应中可保持 70h 的连续反应，失活速率 0.003h^{-1} 和 95% 以上的乙烯选择性，可能由于 Zn 优先覆盖在 Pt 纳米粒子的台阶位上；4）研究 PdZn 金属间化合物上甲醇蒸汽重整反应发现 PdZn 金属间化合物中的 Pd-Zn-Pd 结构中 Zn 向 Pd 转移电子，导致甲醇蒸汽重整反应中反应物和中间产物吸附活化强度适中，从而实现了高活性和选择性。

该博士学位论文工作量大，结构明晰，撰写规范，分析合理，结论可信，表明作者具有宽厚坚实的基础理论和系统深入的专业知识，和独立从事科学研究工作的能力。综上所述，该博士学位论文达到了国家学位条例对博士学位论文的要求，建议组织论文答辩。

<p>是否同意组织学位论文答辩</p> <p>（请在相应栏内划“√”）</p>	<p><input checked="" type="checkbox"/> 同意答辩</p> <p><input type="checkbox"/> 修改后答辩（论文需通过小的修改后答辩）</p> <p><input type="checkbox"/> 修改后评阅（论文需通过大的修改后再评阅）</p> <p><input type="checkbox"/> 不同意答辩</p>
---	--