

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%	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%	91
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%	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	91.05

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）

丁倩同学的博士学位论文，在人工光合作用和光催化分解水制氢的文献研究基础上，探讨了分解水制氢这一人工光合成太阳能燃料的关键科学问题。论文创新点如下：

第一，该论文以  $\text{NaTaO}_3$  为研究对象，通过原位红外光谱直接观测到  $\text{NaTaO}_3$  光催化水氧化过程中的  $\text{Ta(VI)=O} (*\text{O}_d)$  和  $\text{Ta(O}_2\text{)}_2$  过氧化物( $*\text{OOH}_s$ )中间物种。结合理论计算，证明  $\text{NaTaO}_3$  催化剂晶格氧参与水氧化过程。

第二，该论文通过  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  光催化全分解水的原位衰减全反射红外光谱直接观测到水分解的中间物种  $\text{H}_2\text{O}_2$  和  $\text{Ga-OOH}^\cdot$ 。结合同位素交换 ATR-IR 光谱和同位素质谱分析，提出  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  基光催化剂光催化全分解水是通过羟基自由基形成机理进行的。

第三，该论文系统地研究了担载  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ -Rh 助催化剂的  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  光催化剂的光生电子动力学，提出  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  对 Rh/ $\text{Ga}_2\text{O}_3$  催化剂的结构修饰促进了电子从  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  到 Rh 纳米粒子的转移过程。

该同学系统全面的查阅了国内外文献，论文结构严谨，层次分明，采用了递进式的分析结构，逻辑性强，文笔流畅，表达清晰，重点突出，论文格式规范，反映作者具有较强的独立科研工作能力。其研究内容证明该学生掌握了专业基础知识和分析方法。

建议修改论文格式，如正文和参考文献格式等；建议增强三个研究章节内容的系统化和体系化。

该论文到达了博士学位论文水平，同意答辩，推荐授予其博士学位。

<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%	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%	80
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%	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%	95
总体评价			总分	87.5

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：（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）

见后面附页。

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（论文需通过小的修改后答辩）

☐ 修改后评阅（论文需通过大的修改后再评阅）

☐ 不同意答辩

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）

多相光催化机理的研究对理解其机理和研制高效光催化剂有着重要的学术价值，但由于其中间体的捕获需要精细的研究技术，所以此领域的研究具有一定的挑战性。该论文使用原位和时间分辨红外光谱研究了 $\text{NaTaO}_3$ 和 $\text{Ga}_2\text{O}_3$ 上光催化分解水机理，以及负载 $\text{Cr}_2\text{O}_3$ -Rh助催化剂的 $\text{Ga}_2\text{O}_3$ 的光生电子动力学，取得了如下创新性研究结果：

（1）采用原位透射红外光谱、质谱、DFT计算，研究了 $\text{NaTaO}_3$ 上光催化全分解水机理。发现光催化过程中生成 $\text{Ta(VI)=O}(*\text{Od})$ 、 $\text{Ta(O}_2\text{)}_2$ 过氧化物( $*\text{OOHs}$ )中间物种，晶格氧参与水氧化反应。提出了通过 $*\text{OH}$ 、 $*\text{Od}$ 、 $*\text{OOHs}$ 进行的三步水氧化反应机理。

（2）采用原位衰减全反射红外光谱和质谱相结合的方法，研究了 $\text{Ga}_2\text{O}_3$ 上光催化全分解水机理。发现水分解的中间物种 $\text{H}_2\text{O}_2$ 和 $\text{Ga-OOH}$ ， $\text{H}_2\text{O}$ 中的氧原子是光催化生成 $\text{O}_2$ 的唯一来源，而 $\text{Ga}_2\text{O}_3$ 光催化剂中的晶格氧不参与水氧化反应。提出 $\text{Ga}_2\text{O}_3$ 光催化剂光催化全分解水是通过羟基自由基机理进行的。

（3）通过分步光沉积法在 $\text{Ga}_2\text{O}_3$ 光催化剂上负载了 $\text{Cr}_2\text{O}_3$ -Rh助催化剂，采用时间分辨红外光谱研究了其光生电子动力学。研究发现助催化剂Rh是光生电子还原产氢的活性中心， $\text{Cr}_2\text{O}_3$ 促进了 $\text{Ga}_2\text{O}_3$ 光生电子向Rh的转移效率，从而提高光催化全分解水活性。

论文选题瞄准的光催化过程中关键的科学问题，撰写规范，表述清楚，实验设计合理，数据可信，结论可靠，研究结果具有高的学术价值。达到博士学位论文基本要求，同意参加答辩。建议论文发表达到要求后授予博士学位。

以下建议供参考和研讨：

- 1、对第三章的  $1060\text{ cm}^{-1}$  峰指认为  $\text{Ta(VI)=O}$  振动，似乎不太好理解有  $\text{Ta(VI)}$ 生成。评审者更倾向于是 $\{\text{Ta-O}\cdot\}$ 自由基，这和第四章引言提到的 $\{\text{Ti-O}\cdot\}$ 一致。
- 2、第五章中  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  促进了电荷转移，提高了光催化活性。评审者认为有可能是相结的生成，建议对其  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ -Rh/ $\text{Ga}_2\text{O}_3$  材料做必要的高分辨电镜、电化学等表征，这样一方面丰富了研究内容，另一方面结合原位光谱表征会更有科学意义。
- 3、P<sub>26</sub> 中图 1.10，看上去只有 3 个  $\text{h}^+$ ，如何能生成氧气分子？请解释。
- 4、P<sub>36</sub> 中钽酸钠合成实验中“过量钠”最好改为“过量的碳酸钠”。

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%	10
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%	10
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%	10
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 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）

本论文采用原位和时间分辨红外光谱研究了光催化分解水机理，得到如下主要创新性研究结果：

（1）NaTaO<sub>3</sub> 光催化水机理研究。原位红外光谱直接观测到 NaTaO<sub>3</sub> 光催化水氧过程中的 Ta(VI)=O (\*Od)和 Ta(O<sub>2</sub>)过氧化物 (\*OOHs)中间物种，H<sub>2</sub>18O 同位素实验表明 NaTaO<sub>3</sub> 晶格氧参与光催化水氧化反应。结合密度泛函理论计算结果，提出了 NaTaO<sub>3</sub> 光催化剂通过 \*OH、\*Od、\*OOHs 进行的三步水氧化反应机理。

（2）Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 光催化水分解机理研究。通过原位衰减全反射红外光谱直接观测到 Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 光催化水分解的中间物种 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 和 Ga-OOH-，H<sub>2</sub>18O 实验表明晶格氧不参与水氧化反应，因此提出 Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 光催化剂光催化剂全分解水是通过羟基自由基机理进行的。

（3）研究了负载 Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Rh/ Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 光催化剂的光生电子动力学。原位时间分辨红外光谱研究表明只有转移到助催化剂 Rh 上的光生电子才能参与析氢反应，而 Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 中的长寿命电子不参与质子还原反应。Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 的负载使 Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 的光生电子向 Rh 的电子转移效率提高，从而提高光催化全分解水活性。这一工作提高了对 Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Rh 复合助催化剂作用的认识。

这些新的机理认识，对构建高效的光催化分解水体系具有重要的参考价值。论文写作比较规范，数据整理和讨论比较充分，结果可信。

不足之处是：1）论文写作上还有不少错误；文献综述不够全面，尤其是时间分辨光谱研究方面；3）提交论文之时，最好相关工作已经发表或者接收。

<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%	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%	32
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%	5
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	12
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	80

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）

光催化分解水制氢是一条重要的太阳能开发利用途径。然而，到目前为止，人们对光催化过程的认识还很有限，对高效光电催化剂的研究大多停留在催化剂的合成和筛选上，对于光催化过程中表面催化活性中心结构和反应动力学，光生电荷在界面传输的过程和在光催化剂表面的分布认识较少。本论文利用原位和时间分辨红外光谱研究了几种代表性光催化材料的水分解机理，并初步探索了助催化剂存在条件下电子传输的动力学，并取得了如下结论：

- [1] 观察到了  $\text{NaTaO}_3$  上光催化全分解水过程中  $\text{Ta(VI)=O}(*\text{O}_a)$ 、 $\text{Ta}(\text{O}_2)$  过氧化物 ( $*\text{OOH}_2$ ) 等重要中间物种的红外谱峰，并结合  $^{18}\text{O}$  同位素标记提出了晶格氧、阴离子在水氧化过程中的重要作用；
- [2] 利用 ATR 研究  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  的全分解水机制，提出物理吸附的  $\text{H}_2\text{O}_2(\text{a})$  及其脱质子物  $\text{OOH}^-(\text{a})$  是主要反应中间物种，证实  $\text{H}_2\text{O}$  中的氧原子是光催化生成  $\text{O}_2$  的唯一来源。
- [3] 利用时间分辨光谱研究了  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  及助催化剂之间的电子转移动力学。发现助催化剂的修饰可以在微秒到毫秒时间尺度影响电子转移的行为。

论文所选题目是太阳能光催化研究的核心问题，前沿部分针对水分解机制的文献综述比较全面、准确，部分发现结果对半导体氧化物水分解机制的研究具有重要参考价值。不足之处在于，论文的写作存在大量的不规范语言表述，例如“被大量水包围”等，有待进一步改进。此外，对于一些谱峰和现象的归属缺乏严谨性和精巧的实验设计，大多源自文献结论。这会影响结论的准确性，希望论文作者在今后的科研生涯中不断提升自己这方面的能力和科研素养。

综上，建议组织该生的学位论文答辩。

<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%	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%	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%	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%	85
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）

光催化分解水制氢是催化领域的重要研究方向。揭示光催化分解水反应的反应机理和动力学对新型光催化剂的开发，提高光催化分解水的转化效率具有特别重要的意义。

该论文中，作者采用原位和时间分辨红外光谱技术，结合量子化学计算对三种光锈花体系的研究光催化分解水中的氧化反应机理进行了深入研究，取得了以下的创新成果：

1.通过对  $\text{NaTaO}_3$  上光催化全分解水机理的实验和理论研究。观测到  $\text{NaTaO}_3$  光催化水氧化过程中的  $\text{Ta(VI)=O} (*\text{O}_d)$ 和  $\text{Ta(O}_2\text{)}_2$ 过氧化物( $*\text{OOHs}$ )中间物种。证实晶格氧参与光催化水氧化反应。结合密度泛函理论计算结果，提出了  $\text{NaTaO}_3$  光催化剂上，通过 $*\text{OH}$ 、 $*\text{O}_d$ 、 $*\text{OOHs}$  进行的三步水氧化反应机理。

2.通过  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  光催化全分解水的原位衰减全反射红外光谱研究，观测到水分解的中间物种  $\text{H}_2\text{O}_2$  和  $\text{Ga-OOH}^-$ 。同位素实验证明  $\text{H}_2\text{O}$  中的氧原子是光催化生成  $\text{O}_2$  的唯一来源，晶格氧不参与水氧化反应。提出了  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  光催化全分解水的羟基自由基反应机理。

3. 通过对搭载了  $\text{Cr}_2\text{O}_3\text{-Rh}$  助催化剂的  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  光催化剂的原位时间分辨红外光谱研究，发现  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  中的长寿命电子很难直接参与质子还原反应。 $\text{Cr}_2\text{O}_3$  的搭载使  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  向  $\text{Rh}$  的电子转移效率提高，增加了用于产氢的光生电子，从而提高了光催化全分解水活性。

论文写作规范，文献综述全面，结论明确，具有较好的创新性。不足之处在于，作者所提出的光解水反应的几种机理还需要更深入的理论和实验证实；论文中还存在多处表述不准确的地方，需要作者进一步修改。

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。

<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>
---	--