

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%	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%	10
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 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）

“二硫化钼限域杂原子的电催化析氢研究”论文作者结合所在课题组特点及优势，通过合成线路设计，制备出多种性能优异的二硫化钼析氢催化剂，并探究了形貌和组成对活性位点性能的优化作用。取得的主要研究结果如下：

1. 发展了模板法合成策略，制备了三维多孔 MoS_2 /石墨烯复合结构催化剂。研究发现：该复合材料可以有效增加 MoS_2 边活性位的数量；此外，石墨烯的引入不仅增加了催化剂整体的导电性，还提升了 MoS_2 的结构稳定性。
2. 设计合成了 MoS_2 限域的 Rh 单原子催化剂，并研究了催化 HER 反应活性。结合理论计算结果发现，限域的 Rh 原子间存在距离协同效应，Rh 原子间的距离会影响邻近面内 S 原子的电子结构及对 H 原子的吸附自由能，从而影响其催化 HER 反应活性。
3. 设计合成了 MoS_2 限域的 FeCo 双原子催化剂，并探究了双金属协同效应及其催化 HER 反应活性。研究表明：限域的 FeCo 双金属间存在协同效应，相比单一金属组分可更好实现对面内邻近 S 原子的调控作用，使其具有更好的 HER 催化活性。

在论文选题上，作者瞄准前沿课题，持续开展创新研究，研究成果无疑有重要的科学意义和应用潜力。论文写作表述清楚，图、表制作规范，分析测试表征内容科学系统，作者能正确运用所掌握的相关知识科学地分析与解释实验现象及问题，已合作发表多篇高水平 SCI 论文。以上成果表明作者有较扎实的基础理论知识和独立从事科学研究的能力。当然，论文存在一些小缺憾，如：28 页：“采用 Al 靶 $K\alpha$ 射线激发源”中 α 应该斜体；31 页：“开发者在该框架内不管完善计算精度和性”，中“不管”错误；2.2.5.1 第二段最后一句话的说法不够客观，HF 方法和 DFT 方法是用不同的方法处理相同的问题，计算精度无法按目前的说法进行比较。HF 近似确实没有考虑关联能，为了解决这个问题目前发展了一些后 HF 的方法。但这个不意味着 DFT 的精度更高，DFT 是利用泛函的概念处理交换能和关联能，泛函的选择决定了计算的精度，无法一概而论。研究内容方面的建议，若能在材料的本征催化活性研究方面更深入些，其成果及重要性可能更令人振奋。综上，本研究论文是一篇较好的博士论文，同意答辩。

<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 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%	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%	10%
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 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）

本论文选题具有重要的基础研究和潜在的实际应用价值，文献资料掌握全面，归纳分析合理，设计制备了多种 MoS_2 限域催化剂，在 HER 反应中表现出了优异的性能，进一步丰富了限域催化概念的内涵，取得了优秀的研究成果。特别是发现了 Rh 原子间的距离会影响邻近面内 S 原子的电子结构及对 H 原子的吸附。论文写作规范，逻辑清晰，语言流畅。

MoS_2 中引入了多种的杂原子，氢的吸附位点是这些杂原子吗？石墨烯的引入为什么提高了 MoS_2 的稳定性？建议在未来的研究工作中考虑电催化剂的批量制备以及电解装置的构建，把优秀的研究成果推向实际应用。

<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%	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%	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%	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%	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%	95
总体评价			总分	93.35

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）

如何利用廉价的材料替代贵金属催化剂通过电解水析氢，对于高效制备清洁可再生能源氢气具有重要的应用价值，也具有很好地科学研究价值。论文以二硫化钼为对象，展开电化析氢研究，取得如下结果：

(1) 构建了三维多孔硫化钼/石墨烯复合结构，增加催化剂的导电性和稳定性，提升硫化钼边活性位数量，限域到硫化钼骨架内的 Co 调变了 HER 反应活性。

(2) 在硫化钼上限域不同浓度和距离的 Rh 单原子，发现在 HER 反应活性中存在有距离协同效应，改变邻近面内 S 原子的电子结构及对 H 原子的吸附自由能，影响其催化 HER 反应活性。

(3) 利用配位络合法制备了硫化钼限域 FeCo 双金属原子催化剂，发现较硫化钼限域单金属 (Co 或 Fe) 而言具有更高的催化 HER 反应活性，具有显著的协同效应。

以上结果具有很好地创新性。论文数据详实，分析合理，论文撰写规范，显示作者有很好地理论功底和独立从事科研的能力。论文达到了博士论文水平，建议组织答辩，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“√”)	<input checked="" type="checkbox"/> √ 同意答辩 <input type="checkbox"/> 修改后答辩（论文需通过小的修改后答辩） <input type="checkbox"/> 修改后评阅（论文需通过大的修改后再评阅） <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 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%	85
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%	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%	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	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 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）

二硫化钼(MoS₂)因其独特的结构和电子性质成为一种潜在的电化学析氢(HER)催化剂。本论文针对现有 MoS₂ 在反应性能上的不足，如：边活性位数量少、导电性差等问题，通过引入石墨烯复合的方法改善了其导电性，通过引入 Co、Rh、FeCo 等杂原子的方法调节了面内 S 原子活性，并结合密度泛函理论计算探究了杂原子掺杂对面内 S 原子电子结构的调控机制，解释了 MoS₂ 限域杂原子材料反应活性提升的根源，对高活性 HER 催化剂的制备和设计具有重要的理论指导意义。该论文选题新颖，条理清楚，结构明确，重点突出，建议组织博士学位论文答辩。

几点建议，供作者修改博士论文时参考：

1. 格式，有些图中有 abcd，但是图注中未给出各自代表的含义，例如图 1.8；论文的图中 ABCD、abcd 运用不一致
2. 有关 IR 补偿，作者认为并未有权威的方法，但是其实文献中大部分是以阻抗法得到的 R 作为补偿的电阻；此外，针对不同的电解质溶液，R 一般有个范围，偏差过大需要考虑电路问题。
3. 针对稳定性问题，其实需要考虑的是 HER 反应最终目的是运用到实际体系，所以应更多的从计时电位或电流方面去考虑催化剂的稳定性，而不是多次循环 CV。
4. 各章引言最好直指该章问题，而不需要重复提及 HER 作为可再生能源的重要性。
5. 第 3 章，是否考虑了石墨烯对 MoS₂ 产生的电子结构影响进而对性能产生影响。
6. 作者所在课题组 2015 年对 Pt 以及包含 Co 在内其他各种金属改善 MoS₂ 进行了研究，论文第 3 章最主要的出发点要介绍清除。
7. 第 4 章阐述了 Rh 距离产生的协同效应，是否有实验上的证据证明面内被影响的 S 是活性位而不是 Rh 原子。
8. 第 5 章研究了 FeCo 双原子的影响，FeCo 双原子的协同作用机制并未阐述清楚，对于其他双金属原子是否有不同影响？这与 Rh 的距离协同效应有什么关联？
9. 如果 V-H 是 HER 机理过程的话，相关的速控步骤应该是 H 吸附还是 H₂ 脱附？与 DFT 计算结果是否一致？

是否同意组织学位论文答辩 (请在相应栏内划“√”)	<input type="checkbox"/> 同意答辩 √ <input type="checkbox"/> 修改后答辩（论文需通过小的修改后答辩） <input type="checkbox"/> 修改后评阅（论文需通过大的修改后再评阅） <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%	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%	97
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%	98
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	94
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	93.05

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）

论文以 MoS_2 二维纳米材料作为研究对象，利用杂原子限域的方式，围绕着电解水制氢工艺展开了探索性的研究，该选题氢能电催化问题进行研究，从非贵金属催化剂的角度出发，具有较高的科学意义和实用价值。作者在整合析氢反应机制及对二硫化钼进行系统的综述过程中，调研充分，全面掌握本领域的发展概况，展示出了本专业扎实的基础理论与对学科前沿动态的清晰认识，具备独立分析问题的能力。

论文从三个方面出发，各有侧重，从催化剂维度和原子尺度对 MoS_2 析氢催化剂进行调节。首先，构建三维多孔 MoS_2 /石墨烯复合结构，提高了催化剂的活性位点与导电性，又通过引入杂原子 Co 进一步调节 HER 活性，实现了性能的提升，作者将二维材料“三维”化，具有结构性创新。第二，研究了 Rh 单原子掺杂到 MoS_2 中，提出了距离协同效应，激活了 Rh 邻近 S 原子的活性并且调变其对 H 的吸附能，从原子间距离维度进行精细的调控。最后，通过双金属 Fe、Co 的引入，对面内邻近 S 原子进行调节，表明 Fe、Co 双金属间存在协同效应。

论文写作规范，文字图表清晰，结构层次合理，文字表达流畅，无明显错误，逻辑性较强，显示出了作者良好的科研素养。不过，作者仍需在未来的科研工作中继续努力，秉承严谨认真的态度，系统性地开展工作。

综上，本论文针对二硫化钼材料在析氢方面的应用开展了相关的研究工作，并取得了创新性的成果。且论文撰写逻辑清晰，综述详实，数据分析合理，结论可靠，是一篇优秀的论文。

<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%	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%	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%	8
总体评价			总分	92

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）

廉价高活性长寿命电解水催化剂是目前国际研究热点。本论文开展二硫化钼限域杂原子的电催化析氢研究，其选题具有重要的理论意义和实用价值。

论文通过模板法制备了三维多孔 MoS_2 /石墨烯复合结构催化剂，有效增加 MoS_2 边活性位的数量；石墨烯的引入不仅增加了催化剂整体的导电性，还提升了 MoS_2 的结构稳定性。

通过合成 MoS_2 限域不同含量 Rh 单原子催化剂并测试其催化 HER 反应活性，结合理论计算结果发现限域的 Rh 原子间存在距离协同效应，Rh 原子间的距离会影响邻近面内 S 原子的电子结构及对 H 原子的吸附自由能，从而影响其催化 HER 反应活性。

论文利用配位络合法制备了 MoS_2 限域 FeCo 双金属原子催化剂，通过电化学测试发现 MoS_2 限域 FeCo 双金属催化剂相比 MoS_2 限域单金属（Co 或 Fe）具有更高的催化 HER 反应活性，原因是限域的 FeCo 双金属间存在协同效应，相比单一金属组分可更好实现对面内邻近 S 原子的调控作用。

上述研究结果具有创新性。

论文书写流畅，综述全面；研究工作目标明确，数据可信，结论合理，具有创新性。表明该生具有扎实的理论基础知识与独立从事科研工作的能力，达到博士学位论文的要求。

建议仔细检查论文中图 3.6c，图 4.9c 和图 5.5d 中商业化 40%Pt/C 催化剂的 Tafel 斜率差异略大，是实验误差还是实验条件不同引起。

<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>
---	--