

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%	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%	95
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）

本论文针对以界面限域氧化亚铁活性中心的催化反应原理，开展了系统的第一性原理密度泛函理论计算，论文选题具有创新性，对新型催化材料的高效筛选和优化设计具有重要的基础科学意义。论文取得的主要成果和创新点包括以下几个方面：

1) 构建了 Pt(111)负载的三角形 FeOx 纳米团簇，考虑了不同的尺寸和几何构型，从电子结构的层面，揭示了从纳米团簇中心到边角不均匀分布的几何结构和受到衬底电子转移作用的影响，以及铁的氧化铁特性。

2) 研究了 Pt(111)负载的 FeOx 纳米团簇尺寸变化引起的界面结合能和界面电荷转移的变化，并分析了背后的规律及原因；探究了还原性气氛下 CuO 边活性随尺寸减小而增强的原因；揭示了小尺寸 FeOx 纳米团簇在氧化还原气氛中重构过程的可能机制及内在驱动力。

3) 构建了氧化铈表面负载的 CeOx 纳米结构模型，提出 Ce 离子的配位数是 CeOx 纳米结构催化转化 CO 反应性的一个有效描述符。构建了 M(M=Pt, Au, Ag) 表面上 Cu₂O 纳米带模型，计算催化氧化 CO 的反应路径，并揭示了催化活性与衬底表面 M 的 d 带中心的定性关联。

4) 构建了 Au 表面负载的 Ce(OH)_x 或 CeOx 纳米团簇，计算表面电化学 CO₂ 还原反应吉布斯自由能图，揭示了界面通过稳定反应中间体*COOH 物种促进反应；构建 Sn/SnOx 界面，计算相应的吉布斯自由能图，指出界面对限制电势的影响效应。

论文书写规范，文笔通畅，符合博士学位论文的要求，论文工作量大，计算数据分析合理，结果可信。论文内容充实，逻辑性强，表明作者具有较强的计算能力和独立科研的能力。综上所述，论文达到博士毕业论文水平，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>
---	--

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%	92
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%	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%	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：（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）

该论文研究了多相催化领域中的一个重要的效应：界面限域效应。针对多个实际的界面结构体系中决定限域团簇的几何构型、电子结构、催化活性的影响因素，进行了系统的研究，提出了深入的认识，从原子/分子层面促进了人们对界面限域催化的理解。该论文的研究成果对优化和设计新的催化材料和催化剂结构具有重要的指导意义。

该论文对相关研究背景以及前人的研究基础做了较详细的阐述与铺垫，明确的提出了相关领域中存在的科学问题，选题意义清晰。针对界面限域氧化物纳米团簇的电子结构、尺寸效应及其两者的关系等问题，阐明了 Pt(111)面负载的 FeO_x 纳米团簇的取向、氧化态、尺寸效应等对界面限域相互作用的影响，并研究了这种相互作用对纳米团簇在氧化还原气氛中重构过程的影响。探究了界面限域氧化物纳米结构中调控 CO 氧化反应活性和选择性的因素，以及氧化物-金属限域界面电催化 CO_2 还原反应体系中的反应机制以及活性调控因素。这些研究加深了对界面限域效应在调控催化剂活性相的几何结构、电子特性以及反应活性上的认识，对扩展界面限域效应在催化剂设计上的应用提供了重要借鉴，具有显著的创新性。

该论文写作总体较规范，逻辑清晰，有些语句偏口语化，需注意用书面语表达。在研究内容的第一部分加入电子结构分析将会更加完善。部分计算数据的展示有些碎片化，进一步凝练与总结可以提高结论的清晰度。

<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）

多相催化中载体与负载纳米结构之间的界面相互作用，对催化反应的活性和稳定性起着重要的影响。界面限域的氧化物纳米催化剂具有丰富可调节的几何结构和电子结构，是一个重要的研究课题。论文围绕这一方向展开理论计算研究，取得如下结果：

(1) 构建 Pt(111)负载的的三角形 FeO_x 纳米团簇，发现从纳米团簇中心到边角不均匀分布的几何结构和受到衬底电子转移作用对亚铁状态稳定性有着重要影响。

(2) 研究了 Pt(111)负载的 FeO_x 纳米团簇尺寸变化引起界面结合能和电荷转移的变化规律，发现还原性气氛下 CUO 边活性随尺寸减小而增强，揭示了小尺寸 FeO_x 纳米团簇在氧化还原气氛中重构过程。

(3) 构建氧化铈表面负载 CeO_x 纳米结构模型，发现 CO 吸附能随 Ce 离子配位数 (CN_{Ce}) 变化的比例关系，构建 M(111) ($\text{M}=\text{Pt}, \text{Au}, \text{Ag}$) 表面上 Cu_2O 纳米带模型，其 CO 氧化的活性可以用衬底表面 M 的 d 带中心定性描述。

(4) 构建 Au 表面负载的 $\text{Ce}(\text{OH})_x$ 或 CeO_x 纳米团簇，发现界面通过稳定反应中间体 $^*\text{COOH}$ 提高电化学反应活性；在 Sn/SnO_x 界面处降低了产甲酸的限制电势，并同时提高了产 CO 和 H₂ 的限制电势，提高了甲酸和 C₁ 产物选择性。

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。

<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%	
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%	
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%	
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	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	
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%	
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）

金属担载纳米氧化物催化剂是一类重要的催化体系，其中存在许多尚待深入探索的重要科学问题，包括纳米氧化物的尺寸效应、纳米氧化物的边界催化作用、氧化物与金属载体之间的相互作用。虽然最近十多年有大量实验进展并对这些问题进行初步的阐述，然后利用理论方法对这些问题在微观、动态层次上进行深入和系统的考察无疑具有重要意义。本论文研究了金属负载的 FeO_x 、 CuO_x 、 CeO_x 等纳米结构，考察了纳米氧化物的几何结构、电子结构、尺寸效应、动态变化以及和催化性能的关联。论文研究内容丰富，在几个研究体系中分别取得重要的研究进展。在 Pt 负载的 FeO_x 模型表面，考察了不同尺寸 FeO_x 团簇中的边界配位与几何结构之间的关系，研究了在气氛中稳定的边界终止状态，提出小尺寸 FeO_x 纳米团簇在氧化还原气氛中重构过程的机制以及驱动力。在金属负载 CeO_x 纳米结构模型中，计算了表面催化转化 CO 的反应路径以及反应性能和 Ce 离子配位数的关联，提出 Ce 的配位数可以作为描述该体系催化性能的一个有效参数。此外，还将金属担载 CeO_x 纳米结构用于电化学反应，研究了界面在反应中间体的形成和稳定中的作用，进一步发现这种氧化物/金属界面在电化学反应中的重要作用。论文重点讨论和提出可以利用一个描述符来概括纳米氧化物催化反应中普遍性规律，按照我的理解这种描述符应该是普适性的概念，不仅仅是在 1-2 体系中得以体现，所以如果作者想提出这个概念，可能需要在较多体系中做筛选性研究，来考察这种描述符的有效性。另外论文文字还需要仔细检查，有一些笔误存在，在修改中可以更正。本论文研究内容丰富，研究数据分析合理、研究层次清晰、结果讨论清楚，符合博士论文的要求，推荐进行博士论文答辩。

<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)
	<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%	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%	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%	85
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%	80
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%	88
总体评价			总分	85.25

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）

周质文的博士论文围绕界面限域的氧化物纳米催化过程和反应，通过密度泛函理论计算研究了几方面的科学问题，包括 1) 构建 Pt(111)负载的的三角形 FeO_x 纳米团簇，分析其在 Pt(111)上负载构型的主要影响因素；2) 研究了 Pt(111)负载的 FeO_x 纳米团簇尺寸变化引起的界面结合能和界面电荷转移的变化规律及其原因；3) 构建氧化铈表面负载的 CeO_x 纳米结构模型，计算其表面催化转化 CO 的反应路径并做出 CO 的吸附能随 Ce 离子的配位数(CN_{Ce})变化的比例关系；4) 构建 Au 表面负载的 $\text{Ce}(\text{OH})_x$ 或 CeO_x 纳米团簇，计算其表面电化学 CO_2 还原反应吉布斯自由能图，说明界面通过稳定反应中间体*COOH 物种促进电化学反应活性。选题具有重要的意义，文献调研完整，掌握了研究的现状和前沿问题。

其研究揭示其从纳米团簇中心到边角不均匀分布的几何结构和受到衬底电子转移作用影响而维持亚铁状态等特性，提出了小尺寸 FeO_x 纳米团簇在氧化还原气氛中重构过程的可能机制并分析背后的驱动力。构建 M(111) (M=Pt, Au, Ag) 表面上 Cu_2O 纳米带模型，计算其催化氧化 CO 的反应路径并指出催化活性可以由衬底表面 M 的 d 带中心定性描述，解释了在 Sn/SnO_x 界面电化学性能提高的原因。研究内容和结论具有创新之处，写作规范，逻辑性强。

建议进一步加强理论模型的包容性，实现对将来新型催化剂设计的理论指导建议。

<p>是否同意组织学位论文答辩 (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%	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%	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%	82
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%	83
总体评价			总分	优秀（90.0）

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）

表面负载的金属氧化物纳米催化剂的界面限域效应使其呈现独特的结构和物理化学性质，在催化中具有巨大的应用潜力。本论文采用周期性密度泛函理论，研究了 FeO_x 、 CeO_x 和 Cu_2O 等纳米团簇负载在表面上的几何结构、电子结构和催化性能，探讨了限域效应、尺寸效应及氧化还原气氛等因素对结构和催化活性的影响，取得了如下创新成果：1) 发现了 $\text{Pt}(111)$ 负载的三角形 FeO_x 纳米团簇中从团簇中心到边角电子结构变化的规律和受到衬底电子转移作用影响而维持 Fe(II) 状态；2) 揭示了 $\text{Pt}(111)$ 负载的 FeO_x 纳米团簇尺寸变化引起的界面结合能和界面电荷转移的变化规律并分析了其原因；3) 发现了 Ce 离子的配位数是判断 CeO_x 表面 CO 的吸附催化活性和选择性的有效描述符，并研究了催化活性与衬底表面的 d 带中心描述符之间的关系；4) 揭示了 Au 表面负载的 Ce(OH)_x 或 CeO_x 纳米团簇和 Sn/SnO_x 界面上 CO_2 电化学还原反应活性的规律。

相关成果在基础研究和应用领域都有重要的理论意义。论文文献综述较为全面，在纳米团簇和载体间相互作用及催化活性分析中结合了多种理论方法，体现了作者较好的研究基础和学术水平。论文将理论和实验相结合，工作量大，写作较规范，逻辑性较强，是一篇较为优秀的博士学位论文。

不足之处如下：1) 一些专业术语没有定义（如 CUO 和 CUF ）；2) 申请人对计算化学的基础理论不够熟练，理论方法部分许多表述不够准确，如 p.18, “... 是有效势(effective potential)或者赝势(pseudopotential)”。这里的有效势与赝势(pseudopotential)是完全不同的概念；p. 19, “需要将体系电子的自旋波函数(spin wave function)表示为若干个基函数的线性组合”这一表述有误；等等。3) 论文的英文摘要的文法和表达均有待改进(例如，we in-depth study...)。

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
----------------------------------	---