

答辩委员会决议

答辩委员会对论文的学术评语（论文选题意义，论文创新性成果及学术水平；论文写作规范化和逻辑性；论文存在的主要不足之处，答辩情况。）：

论文题目：低维非铅钙钛矿及金属卤化物纳米晶光电性质研究

学生姓名：程鹏飞

论文作者开发了多种二维非铅钙钛矿及零维金属卤化物纳米晶材料，并重点研究了它们的光电性质。论文选题新颖，具有重要的科学意义及应用前景。

开发了一种具有 2.12 eV 直接带隙的新型二维锗基钙钛矿材料： $(\text{PEA})_2\text{GeI}_4$ 。该材料在室温下发出寿命较长的荧光。该工作拓宽了二维层状钙钛矿材料的研究范围，为新型非铅钙钛矿材料的设计提供了新思路。在此基础上，用锡部分取代锗，合成了二维锗锡混合钙钛矿材料：

$(\text{PEA})_2\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x\text{I}_4$ 。该材料的带隙随着锡含量的增加而线性减小，带隙的调节范围为 2.13 到 1.95 eV。其中， $(\text{PEA})_2\text{Ge}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}\text{I}_4$ 带隙最小，室温下荧光寿命超过 2 ns。

采用了热注射法合成了无机零维非铅卤化铜纳米晶： $\text{Cs}_3\text{Cu}_2\text{I}_5$ 。该材料在空气中具有良好的稳定性，可发出量子产率达 67% 的蓝光。样品的荧光光谱呈现较大的斯托克斯位移和宽带发射特征，并经飞秒瞬态吸收光谱证实了，该现象与自缺陷激子的存在有关。

论文结构严谨，层次分明，写作规范。表明了作者具有扎实的学科基础知识和专业知识，具备独立从事科学研究工作的能力，达到了博士学位论文的水平要求。

答辩过程中表述清楚，能够正确回答问题，答辩委员会全票通过论文答辩，建议授予理学博士学位。

答辩委员会主席（签字）：

2019年5月5日

答辩委员会决议

答辩委员会对论文的学术评语（论文选题意义，论文创新性成果及学术水平；论文写作规范化和逻辑性；论文存在的主要不足之处，答辩情况。）：

论文题目：基于平均力势模拟研究可卡因相关结合过程

学生姓名：张玉新

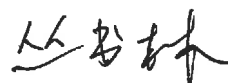
论文作者研究了多巴胺转运体与多巴胺、负型可卡因、正型可卡因的结合过程，以及可卡因酯酶与正型可卡因的结合过程。论文选题具有重要的科学意义和应用背景。

论文采用分子动力学和平均力势（场）方法构建了多巴胺转运体与多巴胺、负型可卡因、正型可卡因结合的复合物模型，计算了相应的结合自由能。计算结果显示，多巴胺转运体与正型可卡因结合能够形成一个 5.6 kcal/mol 的自由能垒，而与正型可卡因以及多巴胺结合则不产生自由能垒。作者还构建了可卡因酯酶与正型可卡因结合的复合物模型，给出可卡因酯酶与正/负型可卡因的结合自由能曲线。研究结果表明，可卡因酯酶与负型可卡因结合不产生自由能垒，而与正型可卡因结合则形成 2.0 kcal/mol 的自由能垒。作者详细分析了产生自由能垒的原因及其对结合过程的影响。上述研究结果对实验上合成新型抗可卡因酶具有指导意义。

论文写作规范，逻辑严谨，分析深入，讨论充分，表明作者具有坚实的理论基础知识和独立从事科学研究工作的能力。

答辩过程中表述清楚，能正确回答问题，但是由于其文章、成果并未达到博士学位要求，答辩委员会建议毕业，待文章、成果满足博士学位条件后，再授予博士学位。

答辩委员会主席（签字）：



2017年5月19日

答辩委员会决议

答辩委员会对论文的学术评语（论文选题意义，论文创新性成果及学术水平；论文写作规范化和逻辑性；论文存在的主要不足之处，答辩情况。）：

论文题目：F 与 H₂/D₂ 反应的态-态动力学研究
学生姓名：黄龙

论文作者利用交叉分子束方法和氢原子里德堡态飞行时间谱技术对 F + H₂, F + D₂ (v=1) 等重要的三原子反应进行了深入的态-态动力学研究，获得了以下具有创新性的重要研究成果：

1、精确测量了低碰撞能下量子态分辨的 F + H₂ 反应后向散射谱和产物微分截面。首次在 5 meV 附近的碰撞能下观测到清晰的量子态共振特征。结合理论计算，证明了在低温条件下该体系中非绝热效应的影响不可忽略，发现由反应共振态增强的量子隧穿效应是低温下 F+p-H₂ 表现出显著反应性的原因。

2、精确测量了振动激发的 F + D₂(v=1) 反应的 5 个不同碰撞能下的反应微分散射截面，观测到显著的前向散射，并测量了前向散射 DF 产物信号随碰撞能变化的曲线，详细分析了振动激发对该反应的影响。

论文写作规范，逻辑严密，数据可靠，分析合理，解释清楚。表明作者具有坚实的理论基础知识和独立从事科研工作的能力。

答辩过程中能正确回答问题，全票通过论文答辩，建议授予博士学位。

答辩委员会主席（签字）：

2019 年 5 月 8 日

答辩委员会决议

答辩委员会对论文的学术评语（论文选题意义，论文创新性成果及学术水平；论文写作规范化和逻辑性；论文存在的主要不足之处，答辩情况。）：

论文题目：低温离子阱红外光解离光谱仪器搭建及其在离子团簇研究中的应用
学生姓名：雷鑫

论文作者自主研制了一套基于低温离子阱的红外光解离光谱装置，利用该装置研究了三甲胺、二甲胺、二氧化碳等一系列大气化学相关的重要离子团簇，并与理论计算相结合阐明了其几何结构、电子性质、成键和结构演化规律，取得了以下创新性研究成果：

1、研究了三甲胺离子团簇 $(TMA)_n^+$ 的红外光谱和结构。结果表明，三甲胺离子团簇倾向于形成电荷共用型的 $(TMA)_2^+$ 离子核。随着团簇尺寸的增大，三甲胺分子以类似溶剂的形式分布在离子核周围。

2、研究了二甲胺离子团簇 $(DMA)_n^+$ 的红外光谱和结构。发现二甲胺离子团簇倾向于形成氢原子转移型离子核 $(CH_3)_2NH_2^+$ 。

3、研究了不同离子阱温度时的二氧化碳三聚体团簇 $(CO_2)_3^+$ 的红外光谱。结果表明，当离子阱温度为 15 K 时，二氧化碳三聚体离子主要形成电荷局域分布的结构。离子阱温度升高时发现了正电荷在三个 CO_2 分子中离域分布的结构。

论文选题新颖，撰写规范，表述清楚，逻辑性强，数据翔实，分析合理，结果可信。表明作者具有扎实、系统的基础理论知识和独立从事科研工作的能力。

答辩过程中能正确回答问题，全票通过论文答辩，建议授予博士学位。

答辩委员会主席（签字）：



2019 年 2 月 25 日

答辩委员会决议

答辩委员会对论文的学术评语（论文选题意义，论文创新性成果及学术水平；论文写作规范化和逻辑性；论文存在的主要不足之处，答辩情况。）：

论文题目：含时密度泛函方法研究荧光化学传感器的传感机理

学生姓名：李杨

该论文利用密度泛函和含时密度泛函理论，对氟离子，硫化氢离子，氟离子，谷胱甘肽 4 种荧光化学传感器的激发态机理进行了深入研究，揭示其传感机制。选题具有一定的理论价值和现实意义，可为设计和研发新型、高效的荧光化学传感器提供了理论基础。

计算发现：

1. 氟离子与传感器分子 M1 发生亲核加成反应，破坏了乙烯基的碳碳双键共轭结构，阻碍了分子内电荷转移（ICT）过程，并且高粘度的 DMSO 溶剂抑制了激发过程中产物构型的扭转。与传感器 M1 相比，产物具有较弱的 ICT 特征，使得其吸收光谱有明显的蓝移和荧光增强现象。
2. 吸电子 2, 4-二硝基苯基团促使传感器 HBTPP-S 发生光致电子转移过程（d-PET），导致分子荧光猝灭。硫氢根离子与 HBTPP-S 发生硫解反应，生成的硫解产物 HBTPP 通过激发态分子内质子转移（ESIPT）和扭转的 ICT 过程发射出强荧光。
3. 在 DMSO 和水的混合溶液中，具有吸电子基团硝基的传感器 1c 与氟离子和水分子通过氢键相互作用形成氢键产物 $1cFH_2$ 。激发态氢键与 ICT 过程共同导致氟离子产物 $1cFH_2$ 的荧光强度减弱。
4. 谷胱甘肽可去除传感器 AHBO 中的叠氮基团，产物经历 ESIPT 和较弱的 ICT 过程，表现出较强的荧光发射。

论文写作规范，表述清楚，逻辑严谨，分析合理，结论可信。表明作者具有扎实的理论基础和专业知识，具备了独立从事科学研究的能力。该论文达到了博士学位论文的水平要求。

答辩过程中表述清楚，能够正确回答问题，答辩委员会全票通过论文答辩，建议授予理学博士学位。

答辩委员会主席（签字）：

赵建章

2019 年 5 月 7 日

答辩委员会决议

答辩委员会对论文的学术评语（论文选题意义，论文创新性成果及学术水平；论文写作规范化和逻辑性；论文存在的主要不足之处，答辩情况。）：

论文题目：几个含能材料体系的量子化学以及分子力学理论计算研究

学生姓名：刘润泽

该论文利用量子力学以及分子力学方法对四个新型材料体系进行了理论研究。论文选题新颖，有重要科学意义和应用前景，取得了以下创新性研究成果。

本文利用高精度量子力学方法深入研究了芳基五唑的合成机理，揭示了芳基五唑的中间产物以及不同反应通道之间的关联。计算结果发现 *trans-cis* 结构是得到芳基五唑产物的核心中间产物，脱 N_2 与成环反应二者的竞争关系决定了芳基五唑的产率，提出了提高产率的方案。

本文利用 DFT/TDDFT 方法揭示了荧光探针分子 HPICI 检测爆炸物分子 TNP 的机理。研究表明，HPICI 探针分子的发光过程不是激发态质子转移过程。HPICI 分子通过 $\pi-\pi$ 和分子间氢键作用与 TNP 分子形成复合物，发生分子间电荷迁移导致了荧光的猝灭。

本文通过建立合理的理论模型和分子力场模拟，研究了储氢材料氢化镁纳米颗粒前驱体的生成反应机理，并模拟了与石墨烯纳米材料相互作用的动力学过程。

论文写作规范，表述清楚，逻辑严谨，结论正确。表明作者具有扎实的理论基础和专业知识，具备了独立从事科学研究的能力。该论文达到了博士学位论文的水平要求。

答辩过程中表述清楚，能够正确回答问题，答辩委员会全票通过论文答辩，建议授予理学博士学位。

答辩委员会主席（签字）：

赵建章

2019年5月6日

答辩委员会决议

答辩委员会对论文的学术评语（论文选题意义，论文创新性成果及学术水平；论文写作规范化和逻辑性；论文存在的主要不足之处，答辩情况。）：

论文题目： 碳氢化合物高温燃烧裂解反应机理研究

学生姓名： 刘雅兰

论文作者采用分子反应力场方法研究了燃料在燃烧过程中微观反应动力学机理。本文的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。论文选题新颖，具有重要的学术价值和应用背景。

作者研究了甲基环己烷的高温裂解过程与机理，计算给出了与实验结果相符的甲基环己烷高温裂解的表观活化能，并得到了主要产物分布和所涉及的中间反应过程，构建了甲基环己烷高温裂解反应的流程图。

作者研究了甲基环己烷在不同条件下的高温氧化机理。分析了主要中间体以及产物的动力学行为，构建了甲基环己烷高温氧化反应的流程图。计算给出甲基环己烷在不同等量比条件下氧化的表观活化能为 59-65 千卡/摩尔。

研究了 NO 对甲烷燃烧反应机理的影响，以及该过程中 NO 的转化和相关氮氧化合物形成的详细反应机理，发现 NO 对甲烷氧化过程有双重影响。

论文写作规范，表述清楚，逻辑严谨，文献综述全面，结论正确。研究结果具有创新性。表明作者具有扎实的理论基础和专业知识，具备了独立从事科研工作的能力。该论文达到了博士学位论文的水平要求。

答辩过程中表述清楚，能够正确回答问题，答辩委员会全票通过论文答辩，建议授予理学博士学位。

答辩委员会主席（签字）：

2019 年 5 月 8 日

答辩委员会决议

答辩委员会对论文的学术评语（论文选题意义，论文创新性成果及学术水平；论文写作规范化和逻辑性；论文存在的主要不足之处，答辩情况。）：

论文题目： 基于 DFT/TDDFT 理论对于含能材料荧光探针检测机理的研究

学生姓名： 吕美横

该论文以密度泛函和含时密度泛函理论为基础，选取了三类典型的用于检测常见含能材料 TNT 和 TNP 的小分子荧光探针，并对探针与含能材料的结合方式及传感机理进行了深入研究。选题具有重要的科学意义和应用背景，取得了以下创新性研究成果：

在 PTBE 体系的研究中，作者通过吉布斯自由能和电子光谱分析发现 PTBE 探针与 TNT 是通过 π - π 堆积作用进行结合，且 PTBE 探针的传感检测机理是基于光致电子转移过程。在 PO 体系的研究中，作者通过吉布斯自由能和核磁共振氢谱对 PO 分子与 TNT 的结合构型进行了研究，发现体系的局部激发态和电荷转移态之间存在能级交叉现象。对于检测 TNP 的三吡啶系列探针，作者分析了该系列探针的电子光谱存在差异的原因，并将其归结为分子内构型扭转对体系激发过程造成的影响。以上研究结果为新型高效荧光探针的设计发展提供了理论基础。

论文写作规范，表述清楚，逻辑严谨，结论正确。表明作者具有扎实的理论基础和专业知识，具备了独立从事科学研究的能力。该论文达到了博士学位论文的水平要求。

答辩过程中表述清楚，能够正确回答问题，答辩委员会全票通过论文答辩，建议授予理学博士学位。

答辩委员会主席（签字）：



2019 年 5 月 7 日

答辩委员会决议

答辩委员会对论文的学术评语（论文选题意义，论文创新性成果及学术水平；论文写作规范化和逻辑性；论文存在的主要不足之处，答辩情况。）：

论文题目：激发态质子转移体系的理论研究

学生姓名：任广华

论文作者采用密度泛函和含时密度泛函理论计算方法并结合光谱实验测量，研究了双性离子发光材料、新型双质子转移体系和防晒霜分子材料中激发态质子转移特性。论文选题具有重要的学术价值和应用背景。

论文取得了如下创新性研究成果：1) 研究发现在联吡啶苯酚和 F 离子发生激发态质子转移之后，可引发进一步的激发态质子转移反应，生成具有双性离子特性的同分异构体，解释了实验观测的荧光光谱现象。2) 设计了一种双质子转移分子，从理论上研究了激发态电荷转移驱动双质子转移反应机理，发现质子和电子均可以在激发态完成转移反应。3) 研究了防晒霜分子氧苯酮的光防护机理。发现在 S_2 态，可以产生电荷转移耦合的无能垒激发态分子内质子转移反应，且不依赖于溶剂特性；而在 S_1 态，水的氢键网络结构可以诱导氧苯酮将其质子转移给水溶剂，生成氧苯酮阴离子和具有 Eigen 结构的水合氢离子。

论文写作规范，表述清楚，逻辑严谨，文献综述全面，结论正确。表明作者具有扎实的理论基础和专业知识，具备了独立从事科研工作的能力。该论文达到了博士学位论文的水平要求。

答辩过程中表述清楚，能够正确回答问题，答辩委员会全票通过论文答辩，建议授予理学博士学位。

答辩委员会主席（签字）：

2019 年 5 月 8 日

答辩委员会决议

答辩委员会对论文的学术评语（论文选题意义，论文创新性成果及学术水平；论文写作规范化和逻辑性；论文存在的主要不足之处，答辩情况。）：

论文题目： 钙钛矿微晶及纳米晶载流子动力学研究

学生姓名： 杨斌

该论文利用飞秒时间分辨光谱技术，研究了有机无机钙钛矿及非铅钙钛矿微晶及纳晶的载流子动力学机制。选题契合当下对新能源转化材料的发展趋势，为设计和研发高效微纳光电器件提供了理论基础。

研究发现有机无机钙钛矿材料具有较低的双光子受激辐射阈值 (2.2 mJ cm^{-2})。采用光电流成像技术研究了其电荷传输机制。制备了具有超高灵敏度的全无机钙钛矿微晶 (CsPbBr_3) 光电探测器。时间分辨荧光光谱研究发现其载流子存在快速扩散行为，载流子迁移率超过 $100 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ ，实现了高效的电荷传输。该微晶光电探测器具有超高的响应度 (10^4 A/W) 和较快响应时间 (1 ms)。通过对含铅钙钛矿载流子动力学的研究，探究了载流子迁移率、缺陷态密度及有效电荷传输与光电子器件性能的关系。

在上述工作基础上，研究了非铅钙钛矿纳米晶中的载流子动力学。研究表明，缺陷态捕获是限制非铅钙钛矿纳米晶发光效率的重要因素；发现了表面缺陷和光诱导自陷态两种缺陷态；表面缺陷可以通过表面活性剂调节，自陷态主要是由强烈的电子-声子耦合效应导致，其物理本质对应材料的间接带隙。认为设计具有直接带隙的非铅钙钛矿是实现高效发光的关键，并制备了一组高效发光的直接带隙非铅钙钛矿纳米晶。该研究为设计高性能非铅钙钛矿材料提供重要的理论和实验依据。

论文写作规范，表述清楚，逻辑严谨，文献综述全面。研究工作目标明确，工作量大，数据分析合理，结论可信，研究结果具有创新性。表明作者具有扎实的理论基础和专业知识，具备了独立从事科研工作的能力，达到了博士学位论文的要求。

答辩过程中表述清楚，能够正确回答问题，答辩委员会全票通过论文答辩，建议授予博士学位。

答辩委员会主席（签字）：



2018年12月16日

答辩委员会决议

答辩委员会对论文的学术评语（论文选题意义，论文创新性成果及学术水平；论文写作规范化和逻辑性；论文存在的主要不足之处，答辩情况。）：

论文题目：

吡咯分子及其衍生物的激发态超快动力学研究

学生姓名：杨栋元

论文作者利用飞秒时间分辨的光电子/离子速度成像技术研究了吡咯分子及其衍生物（N-甲基吡咯、2, 4-二甲基吡咯、2, 5-二甲基吡咯）的激发态超快动力学，获得以下具有创新性的重要研究成果：

1、研究了吡咯分子及其衍生物在紫外光波段的激发态超快动力学。通过实验结果对比，讨论了甲基取代效应对分子激发态动力学的影响，发现吡咯环上的甲基取代增强了到基态的内转换的过程，氮原子上的甲基取代大大抑制了第一电子激发态的解离速率。

2、利用双光子激发研究了吡咯分子高电子激发态的超快动力学，得到了 4s 态以及一些更高电子激发态的衰变机理和速率。

3、利用动态斯塔克效应实现了吡咯分子解离过程的量子控制，在实验上观测到了 N-H 键断裂通道的减少。

论文写作规范，数据翔实，逻辑严谨，分析深入，结论可靠，体现了作者具有扎实的专业知识和独立从事科研工作的能力。

答辩过程中能正确回答问题，全票通过论文答辩，建议授予博士学位。

答辩委员会主席（签字）：

徐俊峰

2019 年 5 月 8 日

答辩委员会决议

答辩委员会对论文的学术评语（论文选题意义，论文创新性成果及学术水平；论文写作规范化和逻辑性；论文存在的主要不足之处，答辩情况。）：

论文题目： 基于金属铂的超分子配位化合物激发态动力学研究

学生姓名： 张瑞玲

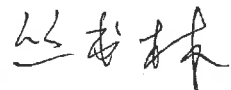
论文作者利用飞秒、皮秒、纳秒全时域时间分辨光谱实验并辅以理论计算，研究了基于金属铂的超分子配位化合物的激发态动力学机制。论文选题新颖，具有重要的学术价值，取得如下创新性研究成果。

研究了基于 C60 的金属铂基二维环状超分子配位化合物单体分子和多体分子在不同浓度溶液中的光物理性质和激发态动力学机制。发现二维环状超分子配位化合物可以形成具有磷光发射的三重态激基复合物。

研究了具有主客体电荷转移性质的封装晕苯的三维铂金属笼激发态超快动力学机制。得到了光激发后电荷从客体向外部分子笼转移的速率常数，分析了主客体电荷转移态的超快动力学过程。

论文写作规范，表述清楚，逻辑严谨，结论正确。表明作者具有扎实的理论基础和专业知识，具备了独立从事科学研究的能力。该论文达到了博士学位论文的水平要求。

答辩过程中表述清楚，能够正确回答问题，答辩委员会全票通过论文答辩，建议授予理学博士学位。

答辩委员会主席（签字）： 

2019 年 5 月 5 日

答辩委员会决议

答辩委员会对论文的学术评语（论文选题意义，论文创新性成果及学术水平；论文写作规范化和逻辑性；论文存在的主要不足之处，答辩情况。）：

论文题目：检测酶的双光子和近红外荧光探针：设计、合成、应用与机理

学生姓名：张学祥

该论文提出了基于局域亲电性指数 ω_k 设计荧光探针的新思路，设计制备了检测酶的双光子以及近红外荧光分子探针。选题瞄准国际研究前沿，具有重要的学术价值。

该论文利用了 1, 8-萘酰亚胺 (NI) 荧光团骨架的 ICT 效应，设计合成了 β -半乳糖苷酶探针 NI- β Gal，实现了对细胞中 β -半乳糖苷酶的高灵敏度双光子比率检测，成功用于移植肿瘤活体检测瞬时表达的 β -半乳糖苷酶。

该论文引入局域亲电性指数 ω_k 用于表征探针与谷胱甘肽 (GSH) 之间非酶促反应的背景噪音，将不同的识别基团连接到 NI 荧光团骨架上，最终筛选得到的 NI3 为 NI 系列探针中性能最优的双光子荧光探针，成功应用于细胞及组织切片中的谷胱甘肽硫转移酶 (GST) 检测成像。

该论文进一步改用近红外荧光团 HCy，筛选出探针 HCy2 和 HCy9，最终成功实现对细胞、组织及小鼠活体移植肿瘤中 GST 的近红外荧光检测。

该论文通过飞秒瞬态吸收光谱实验捕捉到了 NI 和 HCy 系列探针的光致电子转移过程，并辅以量化理论计算阐明了该荧光猝灭机理。

上述研究为设计和研发低背景噪音的荧光探针提供了理论基础和应用范例，具有较好的创新性。

论文写作规范，表述清楚，逻辑严谨，结论正确。表明作者具有扎实的理论基础和专业知识，具备了独立从事科学研究的能力。该论文达到了博士学位论文的水平要求。

答辩过程中表述清楚，能够正确回答问题，答辩委员会全票通过论文答辩，建议授予理学博士学位。

答辩委员会主席（签字）：



2019年5月6日