

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%	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%	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%	92
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）

多孔材料在气体的分离、存储、纯化等方面具有广泛应用，但如何选取合适的材料是目前面临的难点之一，其中具有潜在前景的方法之一是采用理论模拟来进行大规模材料的筛选。为了达到这一目标，论文构造了吸附剂与吸附质气体小分子间的相互作用的力场，取得的成果包括（1）建立了一套适合于 Morse 势这种指数型范德华函数的组合规则并利用该组合规则拟合了一套精确的范德华力场参数，并且利用该参数成功模拟了各种多孔材料中的气体吸附性质；（2）结合量子力学推导和数学近似得出了一个更加准确、简单的范德华力场函数 Exp-PE，并验证了它的适用性等。

论文选题为学科前沿，具有较大理论意义和实用价值；论文体现出了作者在理论化学学科及相关领域具备了坚实宽广的理论基础与系统深入的专门知识，具备独立开展科研工作的能力；论文分析方法科学，研究深入，工作量饱满，材料翔实，善于总结提炼。推荐申请博士学位答辩。

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 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%	88
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%	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%	90
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%	90
总体评价			总分	87.8

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）

计算模拟工作在材料设计与应用方面有无可比拟的优势，而精确高效的分子力场是计算模拟的基础，本论文在范德华力场的发展和应用方面做了一系列的研究工作，论文主要围绕力场函数模型以及精确模型参数展开。针对 LJ 势和 Morse 势的优缺点，作者首先提出了一套新的适合于 Morse 势的组合规则 DRS，并利用混合气体第二维里系数和甲烷的吸附模拟验证了该规则的可靠性。利用该组合规则提出了一套精确的范德华力场参数，并利用该参数成功模拟了各种多孔材料中的气体吸附性质，与实验结果符合良好。此外作者结合量子力学推导和数学近似，提出了一个新的范德华函数形式 Exp-PE，该函数形式对范德华作用的描述，尤其是长程色散性质的描述的精确的有明显的提高，并具有良好适应性。

本论文选题合理，文献综述全面，计算方法科学，研究数据详实，研究结果具有一定的创新性，有助于加深人们对分子力场的认识，提高计算精度，扩展计算模拟方法的应用范围。表明作者具有坚实的理论基础，具有可以独立从事科研工作的能力，达到博士学位论文标准。

论文不足之处：在力场的发展中，力场和力场参数的普适性、精确性以及计算效率都是非常重要的因素，建议作者可以在后续做系统性的研究。

<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%	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%	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%	9
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）

多孔材料如分子筛、金属有机框架化合物(MOFs)、共价有机化合物 (COFs)等在气体储存、分离、纯化以及催化方面表现出了巨大的潜在应用价值。如何在被合成出来的众多新材料当中筛选出合适的材料用于气体的分离、存储、纯化是一个极具挑战性的课题。实验筛选的办法耗时长盲目性高，而计算模拟的精度主要取决于力场模型对吸附剂与吸附质气体小分子间的相互作用描述的准确程度。本文旨在发展高精度的实用的范德华分子力场，选题有重要的理论意义和使用价值。

力场主要包含两部分：力场函数模型和函数模型参数。因此提高计算模拟的精度主要在于一是尽量选取合适的函数模型，二是获得精确的函数模型参数。本论文的工作主要围绕这两方面展开。一方面申请者提出了一套适合于 Morse 势这种指数型范德华函数的组合规则并利用该组合规则拟合了一套精确的范德华力场参数，并且利用该参数申请者成功模拟了各种多孔材料中的气体吸附性质。另一方面申请者结合量子力学推导和数学近似得出了一个更加准确、简单的范德华力场函数 Exp-PE，并验证了该力场的适用性。

申请者阅读广泛，第一章对力场发展的综述很全面，很好地掌握了国内外动态。研究成果反映出申请者具有坚实的理论基础和系统深入的专门知识，有很强的科研工作能力和创新性。整个研究工作，设计方法先进。论文写作条理清晰，层次分明，文笔流畅，学风严谨。

总体而言，论文错漏很少。个别地方可以改进，如为了完整性，建议表 2.9 可以把本工作的 New Rules 也列出，而且 Equations(5),(6),(7)在文中并不是正确标号，应改正。

总体而言，这是一篇优秀的博士论文。

<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)
	√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%	91
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%	92
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	89
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

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）

针对大尺度的材料体系，该论文发展了范德华分子力场，提高了力场描述的准确性，并进行了应用。论文整体具备博士毕业的学术水平，论文的创新点在于提出了一组新的适合于 **Morse** 势的组合规则，并用二元稀有气体混合物的第二维里系数进行了测试和应用。

论文选题意义重大，发展的力场可以准确描述相关材料体系，从而可以得到广泛的理论模拟应用。论文对相关文献总结到位，论文创新之处包括提出了新的适用于 **Morse** 势的组合规则，

论文写作规范，逻辑清楚，从力场函数的背景总结，**Morse** 函数的新的组合规则，到应用，阐述清楚，数据充实，推论合理。

展望部分可以讨论新发展的分子力场的通用性问题的瓶颈，以及新组合规则的拓展问题。

论文达到博士答辩要求，建议进入答辩环节。

<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

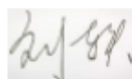
评阅意见

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%	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%	98
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%	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%	90
总体评价			总分	91.7

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）

范德华相互作用在对气体吸附现象和生物分子等非共价键结合体系的分子模拟中起到非常关键的作用，但其经典形式的描述没有非常严格的物理定义。长期以来其形式和参数没有得到足够的关注和改进。该论文针对范德华作用的经典力场描述问题进行了新的探索。选题具有重要的基础科学意义，其成果能在范德华作用起主导的分子模拟中获得广泛应用。该论文在充分文献调研的基础上对现有方法进行了全面仔细的利弊分析。在理论方法上的创新工作主要是（1）提出了一套新的组合规则产生异类原子间的范德华作用能量和几何参数；（2）提出了新的 EXP-PE 范德华力场能量表达式。新的范德华力场短程排斥采用指数形式，长程吸引作用利用幂指数函数相乘的指数形式。既能克服 L-J 势函数短程排斥相互作用过强的缺点，又能弥补 Morse 势函数长程吸引作用衰减过快的不足。这两方面的理论工作的发展，通过拟合实验数据和高精度量子力学计算结果，进行优化获得力场参数，并与传统力场函数形式进行了比较验证。并在气体吸附等分子模拟中获得进一步验证。论文撰写规范，内容详尽，逻辑清晰。论文不足之处是在对传统的伦敦色散公式 $\sim 1/r^6$ 的缺点的详细阐述说明尚还欠缺。因而缺乏对本工作提出幂指数修正的指数形式的长程吸引作用的必要性和正确性的进一步理解和认同。总之，改论文选题具有重大意义，创新性强，应用意义重要。我同意申请人参加博士论文答辩。



<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>
--------------------------------------	--