

附件 6



中国科学院大学
University of Chinese Academy of Sciences

博士学位论文评阅书

论文题目 生物质催化转化 C-C 和 C-O 选择性断键的机理
研究

作者姓名 周茂祥

学位类别 工学博士

学科（专业） 工业催化

研究所（院系） 大连化学物理研究所

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%	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%	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%	10
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	94 律法

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 89 分为良好；大于等于 60 分小于 74 分为一般；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）

论文题目：生物质催化转化 C-C 和 C-O 选择性断键的机理研究

作者姓名：周茂祥

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

不同意答辩

周茂祥博士论文评审意见（导师王爱琴）

“生物质催化转化 C-C 和 C-O 选择性断键的机理研究”

2019-10-25

生物质分子中 C-C 键和 C-O 键选择性断裂的机理研究，是生物质催化转化制备高附加值化学品具有挑战性的课题和关键的科学问题，对于高效催化剂的设计具有重要的参考和借鉴价值。选题具有重要科学意义和应用背景。

论文通过理论计算与实验数据相结合，深入研究了糖类等多羟基化合物典型生物质分子中 C-C 和 C-O 键的催化反应机理。以钨酸和钼酸为均相催化剂，分子或者团簇为反应模型，研究了六碳糖分子的 C-C 键的裂解机理，结果表明，不同的六碳糖在钨酸和钼酸上经历了类似的 C-C 键断裂机理，其断裂的位置与 C=O 键相关。在负载型的氧化钨催化剂上，探索了 Pt 等金属在其表面对于甘油分子中 C-O 键的氢解活性，证实了氧空位对于金属单原子的稳定性所起到的重要作用。论文探索了氧化钼团簇负载的 Pt 基催化剂在乙二醇分子中 C-O 断键机理，研究表明，H₂ 解离生成的质子酸对于 C-O 的断键具有重要的作用。

上述研究结果具有创新性。

论文研究目标明确，思路清晰，对于生物质催化转化中几个重要反应中的 C-C 和 C-O 键选择性断裂有着深入的理解，实验数据分析合理，结论可信。表明作者具有扎实的基础理论和专业知识，具有独立科学研究工作的能力，达到了博士论文学位的要求。同意答辩，建议授予博士学位。

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%	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%	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%	9
总体评价			总分	94

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 89 分为良好；大于等于 60 分小于 74 分为一般；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）

论文题目：生物质催化转化 C-C 和 C-O 选择性断键的机理研究

作者姓名：周茂祥

见附页。

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

不同意答辩

生物质催化转化 C-C 和 C-O 选择性断键的机理研究

对学位论文的学术评语：

周茂祥同学的博士论文围绕生物质催化转化中的关键性问题 C-C 和 C-O 键的选择性断裂展开研究工作，通过系统的密度泛函理论计算和实验手段重点研究了糖单元、丙三醇、乙二醇等生物质分子的选择性活化机制，对固体酸催化剂及其固体酸负载金属催化剂在选择性断键中的本质进行了阐释，发现 1. 固体酸可以促进分子间位 C-C 键的氢转移来选择性活化 C-C 键；2. 固体酸中的氧空位对单原子催化剂稳定作用并通过电荷转移，调控其催化性能；3. 固体酸与金属催化剂界面原位产生质子酸的机制。这些发现均对生物质催化转化的选择性转化具有重要的指导意义。

生物质能在应对能源供需矛盾、保护生态环境方面发挥着重要的作用，是发展新能源的重要选择。该论文基于生物质能的催化转化利用选择题，选题具有重要的学术价值和应用意义。该论文结构合理，文献综述丰富，论证清晰，写作规范，是一篇优秀的博士毕业论文，反映了周茂祥同学具备扎实的基础理论、良好的科研素养和独立的分析解决问题的能力。同意组织其学位论文答辩，并授予其博士学位。

除此之外，文章还有一些细节的地方需要稍加修改，具体如下：

1. 目录页第三章大标题 C-C 有格式错误；45 页标题英文字体格式有小错误。
2. 论文中很多图片中字体格式有不少格式问题：a. 部分图片内容为英文，部分图片内容为中文，需要统一，如图 5.1 与 5.2； b. 图片内容中的文字有部分不清晰或字体不统一，如图 3.7 和 3.9 的字体大小格式不统一。c. 22 页 a b c 三个图以及序号有些错乱，没有对齐。
3. 论文中对能量标注的符号不统一，如 binding energy，图 4.9 中使用的是 E_b 而表 4.4 中则用的是 E 。
4. 本论文主要研究生物质催化转化的选择性问题。对于生物质催化转化的稳定性是否有所考虑？例如，生物质分子在催化加工过程中往往容易发生团聚，可能因此导致催化剂失活。
5. 论文第 4 章是否需要考察 C-O 键在 Pt₁/WO₃ 界面断裂的情形？
6. 论文第 5 章为什么选择单个氧化钼团簇进行机理研究？构建此模型的依据是什么？C-O 键断裂是在还原性条件下进行的，因此研究不同氧氛围条件下的氧空穴形成能是否具有实际价值？

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% 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% 8
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	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 89 分为良好；大于等于 60 分小于 74 分为一般；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）

论文题目：生物质催化转化 C-C 和 C-O 选择性断键的机理研究
作者：周茂祥

将价廉物广的生物质资源转化为高附加值的能源和化学品最为核心是 C-C 和 C-O 的选择性断键，开展此类研究，选题具有重要的理论价值。

以钨酸为催化剂的均相催化研究多种糖类的 C-C 键选择性断裂，建立起催化 C-C 断键机制与反应物分子结构的相关性。在此基础上开展 DFT 计算建立催化剂模型与生物质催化转化的选择性断裂化学键的理论模型，并扩展到与钨酸相似的钼酸催化剂。

构建氧化钨载体及其表面样空位模型，研究了负载型 M_1/WO_x 催化剂的甘油氢解反应性能，氧化钨表面的氧空位电子转移给金属单原子，稳定金属单原子。Pt-H 能款制 WO_x 载体上形成 Bronsted 酸，从而 Pt_1/WO_x 具有双功能催化性能，具有 C-O 键氢解活性。氧化钨分子团簇催化甘油脱水为 3-羟基丙醛。分子簇的增大，其催化甘油为 3-羟基丙醛的活性和选择性降低。

Pt 表面负载氧化钼团簇为催化剂乙二醇 C-O 选择性断键的机制，由于其强相互作用，被部分还原为 MoO_4 ， H_2 在 $MoC_4/Pt(111)$ 催化剂上解离生成质子酸，乙二醇在质子酸作用下生成中间体乙醛。Pt 作为加氢中心加氢制乙醇。

以上研究结果具有明显的创新性。

该博士论文总体来说，工作量大，工作较为系统，选题针对国家需求突出，论文书写文字通顺，推理合理，表明作者有较扎实的理论基础和实验技能，具备独立进行科研工作的能力。建议组织博士论文答辩。

是否同意组织学位论文答辩 (请在相应栏内打“√”)	<input type="checkbox"/> √ 同意答辩 <input type="checkbox"/> 修改后答辩 <input type="checkbox"/> 不同意答辩
------------------------------	---

中科院植物所

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%	39
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	96

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 89 分为良好；大于等于 60 分小于 74 分为一般；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）

论文题目：生物质催化转化 C-C 和 C-O 选择性断键的机理研究

作者姓名：周茂祥

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	<input type="checkbox"/> 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）

论文题目：生物质催化转化 C-C 和 C-O 选择性断键的机理研究

作者姓名：周茂祥

生物质催化选择性 C-C, C-O 断键对于生物质制高值化学品具有重要的作用。论文以分子水平的反应机制为研究重点，通过理论计算的方法，结合实验数据，尝试从分子水平认识生物质与 W, Mo 以及贵金属配位反应物生物质糖类和多元醇相互作用机制，反应活性态结构、活化能等，研究结果发现该反应途径无法认识的奇偶效应行为与金属形态变化以及反应活性无法认识的奇偶效应行为与金属形态变化为解算催化行为提供了新的理论观点。具有很好的创新性。

修改建议：建议尽快整理数据，撰写论文表。

② 材料部分可能应就详细考虑因素进行修改，例如，温度等。

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	<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% 90
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% 85
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% 80
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15% 80
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% 80
总体评价		总分	82

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 89 分为良好；大于等于 60 分小于 74 分为一般；小于 60 分为差。

评议

糖及多元醇的高值化转化对于能源和环境有着重大的意义。本论文主要采用理论计算的方法，对糖的碳碳键断裂和乙二醇与甘油的选择性碳氧键断裂进行了系统的研究，解释了实验中的催化转化过程，认知了相关的机理，为糖及多元醇的转化提供了理论指导。该论文主要取得以下成果，1) 知识了钨酸分子催化生物质糖 C-C 断键机制与分子结构间的相关性，解释了选择性断键的原因；2) 解释了单原子 Pt/WO_x 催化剂对甘油的选择性氢解反应；3) 知识了 MoO_x/Pt 催化剂对乙二醇的选择性氢解反应，提出了稳定的氧化钼团簇和可能的反应过程。

该论文文献调研充分，工作量大，结论合理，具有一定的创新性。论文写作较为规范，满足博士学位论文答辩要求，建议组织答辩。

存在的问题如下：

1. 第 3 章，51-52 页 3.3.3，通过 52 页的论述和图 3.6 判断，在此钨酸催化葡萄糖 C-C 断键只有两条路径，能垒分别为 33.31 和 22.28 kcal/mol，路径 3 不涉及碳碳键断裂，在相关语句“葡萄糖 C-C 断键主要有以下三种反应路径”“三种 C-C 断键反应路径分别如图所示”中需要纠正。在考察葡萄糖 C-C 键断裂时计算了两种路径，而在赤藓糖和甘露糖的断键中只考虑了一条，不存在其他路径吗？第 3 章小结，根据计算，葡萄糖、甘露糖和果糖 C-C 键断裂的反应机理相似，但同时，它们的活性顺序如何？这对转化利用糖基生物质有着重要的指导意义。
2. 第 4 章，76 页，根据吡啶和 2,6-二叔丁基吡啶的控制实验发现，2-丁醇转化只受 Lewis 酸的影响。当通入氢气时，对 2-丁醇转化造成影响，说明产生了 Lewis 酸而不是 B 酸。77 页论述，在多种因素共存时，如何将甘油氢解的活性差异归因于氢溢流？对 4.3.5 部分，考察了不同氧化钨团簇（1-3 个）对甘油加氢选择性的影响，由于实验中使用的是多相氧化钨载体，那么该部分研究对多相氧化钨的设计有何指导意义？
3. 第 5 章，86 页，根据计算表明，MoO₄ 在 Pt(111) 晶面上氧化或还原都难以进行，进而推测 Pt(111) 晶面上 MoO₄ 团簇最稳定，而在此并没有给出其他团簇的氧化或还原所需能量，从而无法比较最稳定的团簇。同样在 89 页，也无法推测在 Pt(100) 晶面上最稳定的团簇是 MoO₁。本章是 MoO_x/Pt 催化乙二醇的选择性断键，那么第 5.3.3 部分计算 Pt 金属负载 WO_x 团簇，与本章的其他内容之间有何联系？5.3.4 部分计算了 MoO₄/Pt(111) 催化乙二醇 C-O 选择性断键，内容只包含乙二醇断裂一个 C-O 键得到乙醇，而乙醇的 C-O 键为何没有断裂，控制 C-O 键选择性的因素是什么，这些问题需要进一步解答。

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%	94
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%	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%	94
总体评价			总分	94.35

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 89 分为良好；大于等于 60 分小于 74 分为一般；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）

论文题目：生物质催化转化 C-C 和 C-O 选择性断键的机理研究

作者姓名：周茂祥

生物质转化过程中的 C-C 键和 C-O 键选择性控制断裂是当前生物质高选择性转化制备化学品的重点和难点。本论文采用理论计算和实验相结合的方法，研究了在钨酸中心上的葡萄糖、甘露糖、果糖中的 C-C 键选择性断裂机制。此外，还研究了 WO_3 以及负载了单金属位点的 WO_x 对于丙三醇 C-O 键选择性断裂的机制。最后，研究了 Pt(111)面上负载 Mo_x 团簇的结构上的乙二醇 C-O 选择性断键的反应机制。工作内容详实，从理论的角度解释了 C-C 键和 C-O 键选择性解离的机制，能够为生物质高选择性转化提供一定的理论借鉴。现提出以下几点建议：

一、钨酸均相催化生物质糖 C-C 选择性断键。在计算模型和方法部分，采用 Gaussian 软件进行计算，在进行热力学校正时，采用 518 K 和 6 MPa 的温度和压力进行校正，为什么采用如此高的压力？是否为了和实验操作条件匹配？建议作者在论文中给出相关说明。作者采用 NBO 计算，从 W 和 Mo 原子的电荷变化的角度，解释钨酸催化 C-C 键断裂的反应活性更高，并提出更高的价态有利于催化生物质糖 C-C 键断裂生成甲酸、乙酸等产物。建议在后续的工作中将不同的氧化态与 C-C 键解离能垒进行关联，寻找其中的规律，并解释其中更深层次的原因。例如，在解离的过程中，W 的 NBO 电荷从+1.78 降低到+1.68，那 C 上的电荷是如何变化的？建议从电荷迁移和成键的角度进一步考虑。

二、氧化钨催化丙三醇 C-O 选择性断键。采用 WO_3 (001)面构建氧空穴，通过载体缺陷调控的方法得到了负载的 Pt 单原子带负电，这与当前文献中所报道的大部分单原子价态都有所不同，同时也是该部分内容的一大亮点。在未来工作中建议关注下列问题：在实验上，通过 XRD 观测到了高度分散的 Pt 和 Pd，但是仍需进一步通过 EXAFS 表征判断是否有 Pt-Pt 键的存在？因为需要进一步确定 Pt 是否是单原子分散的，还是仅仅是较小的团簇？此外，在理论计算上提到了负价的 Pt，但是在实验上是否有进行 XPS 表征，以验证表面的 Pt 的价态是负价的？实验上这一负价的 Pt 是否能够稳定存在？

三、在理论计算上，作者计算了单金属原子在表面上的吸附能，是通过单金属原子的能量进行计算的： $E_{\text{ads}} = E_{\text{M@slab}} - E_{\text{M}} - E_{\text{slab}}$ ，但是采用密度泛函理论计算的单原子能量不一定是合理的，且这样计算得到的吸附能很大可能性为负值。因此，在这里需要直接采用体相金属的能量计算吸附能，用以衡量单金属在表面的稳定性或者团聚的可能性： $E_{\text{ads}} = E_{\text{M@slab}} - \frac{1}{n} E_{\text{M-bulk}} - E_{\text{slab}}$

学术道德评价

(一票否決)

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%	96
2	文献综述	反映该学科及相关领域的前人成果和前动态	15%	92
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%	93
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%	93
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	93.2

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89分为良好；大于等于60分小于74分为一般；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）

论文题目：生物质催化转化 C-C 和 C-O 选择性断键的机理研究

作者姓名：周茂祥

该论文通过结合实验研究和密度泛函理论计算，针对生物质资源转化领域中的糖单元选择性催化转化问题，研究了糖分子 C-C 键选择性断裂制多元醇、丙三醇 C-O 键选择性断键制 1,3-丙二醇以及乙二醇 C-O 键选择性断键制乙醇的反应机理。选题瞄准国际研究前沿，具有重要的学术和潜在应用价值。

该论文在以下几个部分获得创新性成果：首先研究了钨酸均相催化葡萄糖等生物质糖分子 C-C 键选择性断键的反应机理，发现生物质糖中 C=O 双键与邻位 C-C 键的烯醇互变和电子共轭效应影响着 C-C 键断裂的反应位点。然后研究了 Pd、Pt、Au 单原子负载在 WO_x 表面催化丙三醇 C-O 选择性断键的反应机理，发现 Pt/WO_x 由于能同时产生金属氢化物和质子酸而具有双功能催化性质，表现出优越的反应活性和选择性。最后研究了 MoO_3/Pt 催化乙二醇 C-O 选择性断键的反应机理，获得了乙二醇经历脱水、氢转移、C-O 断键生成中间体乙醛、再加氢生成乙醇的机制。这些理解和认识将对生物质转化中产物的调控和催化剂设计产生重要的指导意义。

论文写作规范，逻辑性强，文献综述全面详实，是一篇不错的科研论文。

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	<input type="checkbox"/> 不同意答辩
------------------------------	--	--------------------------------	--------------------------------