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：DFT Calculations on Water Oxidation over Several Typical Metal Oxide Semiconductor Photocatalysts

作者姓名：ANUM SHAHID MALIK

光解水制氢是将太阳能转化为化学能的一种绿色途径，其中水氧化半反应因其复杂的四电子四质子转移过程和较高的反应能垒成为制约水全分解的关键，因此设计合成高效的水氧化光催化剂是该领域亟需攻克的重要课题。金属氧化物半导体因具有合适的带隙位置、较好的物理化学性质、低成本等优点而成为一类重要的水氧化光/光电催化剂。

该论文利用密度泛函理论方法，研究了无缺陷和带有氧空位缺陷的 TiO_2 金红石(110)、锐钛矿(101)和板钛矿(210)表面上水氧化的反应机理，证明了氧空位的存在改变了反应中间体的吸附能和反应机理，降低了反应的过电位，反应产物由双电子过程形成的 H_2O_2 转变为四电子过程的 O_2。作者分析了表面氧空位对 WO_3 水氧化反应动力学的影响，结果表明次表层的氧空位能够显著降低水氧化反应的过电位。同时作者研究了 Mn 掺杂的 $BiFeO_3$ (Mn-BFO)上的水氧化过程，并对反应的活性中心进行了探讨，得出 Mn 掺杂可以显著提高 Mn-BFO 的光催化水氧化活性，但表面活性位为表面的 Fe 原子而非掺杂的 Mn 原子。这些创新性的研究成果对于深入理解金属氧化物半导体上的水氧化过程和实验上制备高活性的水氧化光/光电催化剂具有重要的指导意义。

论文选题属于科学前沿，研究成果具有重要学术意义。作者对国内外该领域的研究动态进行了一定程度的论述。论文科学思想明确，文中采用的计算方法合理，论文内容系统性好，层次分明，分析论述合理，结论正确，达到了博士学位论文的水平。

论文中存在的问题和不足之处：(1)多处写作不规范，例如某些标题序号错误，图 3.3 和图 4.2 横纵坐标标反，图 3.4 的图注不全等等，同时语法错误较多。(2)图 3.3 中数值与论文中论述不相符，表 6-1 中活性中心错误。(3)建议作者在以后的工作中增加对催化剂光学性质部分的计算。

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	□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%	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%	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%	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%	85
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 89 分为良好；大于等于 60 分小于 74 分为一般；小于 60 分为差。

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	□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%	8
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%	7
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%	7
总体评价			总分	83

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：DFT Calculations on Water Oxidation over Several Typical Metal Oxide Semiconductor Photocatalysts

In the present PhD thesis, DFT calculations were performed to study the reactivity of Titania polymorphs with different crystal phases and other oxide materials for OER. The oxygen vacancies and cation doping effect on water oxidation is further explored. The author found that on clean TiO2 surfaces, water oxidation goes through peroxo species consistent with experiments. However, water oxidation takes place through dangling * species on the reduced surfaces. The most stable doping of Mn in BiFO3 has a great influence on OER potential. The thesis is well written, however, the authors have to consider the following issues.

1. The TiO2 surfaces often have different terminates, how to confirm the used termination is stable under reaction condition?
2. The author has studied water splitting on defective TiO2 surfaces. Are there any evidences to prove the existence of abundant oxygen vacancies in TiO2 under reaction conditions?
3. What is the stability when Mn doing in BiFeO3?
4. The equation should be 4h+ + 2H2O → O2(g) + 4H+ in page 2.
5. Lots of places lack of commas.
6. At the beginning of the sentence, the author should capital the first word. While in the sentence, lower case of the words should be considered.

论文答辩组织学位论文答辩（请在相应栏内划“√”）	☐同意答辩	☐修改后答辩	☐不同意答辩

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： **DFT Calculations on Water Oxidation over Several Typical Metal Oxide Semiconductor Photocatalysts**

作者姓名： **ANUM SHAHID MALIK**

氧化物半导体光催化材料的水氧化反应是重要的课题之一。本论文借助DFT计算研究了TiO_2三种晶相活性表面的水氧化反应机理，和氧空位缺陷对于TiO_2水氧化反应电子结构的影响。此外，结合实验研究了WO_3表面氧空位对于水氧化反应动力学的影响及Mn掺杂$BiFeO_3$水氧化性能的作用和影响，具有一定的创新性和学术水平。

论文选题具有很好的理论意义和科学价值，写作规范，有较好的逻辑性。反映了作者较好地了解和掌握了本相关学科的知识和理论，有一定的独立从事科学研究的能力。

博士论文的摘要部分过于简单，建议再加充实后可组织答辩。

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
评阅人签名	戴晓	工作单位	山东大学
专业技术职务	教授	评阅日期	2020年10月21日
是否博导	是	联系地址	山东大学中心校区知新楼 山大南路27号
邮政编码	250100	电　话	13906405623
E—mail	daiy60@sdu.edu.cn		

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： **DFT Calculations on Water Oxidation over Several Typical Metal Oxide Semiconductor Photocatalysts**

作者姓名： **ANUM SHAHID MALIK**

氧化物半导体光催化材料的水氧化反应是重要的课题之一。本论文借助DFT计算研究了TiO_2三种晶相活性表面的水氧化反应机理，和氧空位缺陷对于TiO_2水氧化反应电子结构的影响。此外，结合实验研究了WO_3表面氧空位对于水氧化反应动力学的影响及Mn掺杂$BiFeO_3$水氧化性能的作用和影响，具有一定的创新性和学术水平。

论文选题具有很好的理论意义和科学价值，写作规范，有较好的逻辑性。反映了作者较好地了解和掌握了本相关学科的知识和理论，有一定的独立从事科学研究的能力。

博士论文的撰写部分过于简单，建议再加充实后可组织答辩。

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

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	□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%	8
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%	12
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%	33
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%	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	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。

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： **DFT Calculations on Water Oxidation over Several Typical Metal Oxide Semiconductor Photocatalysts**

作者姓名： **ANUM SHAHID MALIK**

论文运用密度泛函第一性原理计算方法，对三种含氧氧化物光催化水氧化反应机理从原子层面上进行了模拟和分析。研究结果对进一步构筑高效光催化材料提供一定的理论依据。论文选题创新性较强，文献调研适当，基本概述了国内外研究现状。论文撰写规范，思路清晰，数据翔实、内容充实，表明该生已基本具备学科领域的基本理论和专业知识，具有较好的科研能力。

论文的不足之处是：1. 绪言部分对当期已报道的关于OER的理论文献总结介绍不够，2. 英文语法和表达方式需要改进和提高，3. 理论基础部分需要进一步充实

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

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	□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%	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%	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%	83
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%	85
总体评价			总分	82.8

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 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：DFT Calculations on Water Oxidation over Several Typical Metal Oxide Semiconductor Photocatalysts

作者姓名：ANUM SHAHID MALIK

Metal oxides semiconductors are considered as one of the most used photo-catalysts or photo-electrocatalyst for water splitting.

In this dissertation, the water oxidation mechanism over different metal oxide surfaces, as well as the effect of oxygen vacancies and cation doping to water oxidation were study by using density functional theory. The author carried our a systematic comparative DFT investigation of the mechanisms and energetic of water oxidation on rutile TiO_2 110, anatase TiO_2 101, and brookite TiO_2 210 model surfaces. The calculation results shown that the rate limiting steps toward H_2O_2 formation are the OH* formation step for all three phases. PH alters the binding energies of the reaction intermediates but does not affect the selectivity. For oxygen-deficient rutile TiO_2 110, anatase TiO_2 101, and brookite TiO_2 210, water oxidation is found to favor a $4e^-$ process toward dioxygen O_2 evolution via dangling O* intermediate species. In addition, the author also investigated the effect of surface of oxygen vacancy on the oxidation kinetics of WO_3 and found that the sub-layer vacancies give rise to a considerably decreased over-potential. Besides these, DFT calculations for Mn-doped $BiFeO_3$ suggested that surface Fe species rather than Mn species serve as the active sites for water oxidation, so the cation doping had noteworthy effect on the oxygen evolution reaction overpotential.

The topic of this thesis is interest and has good scientific significance. The author presented substantial contents and full calculation data. The research contents presented in the thesis gives an insight of the oxygen evolution reaction mechanism.The results are innovative. It shows that the author has a solid theoretical foundation and meets the requirements of doctoral dissertation.

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