

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：高效水煤气变换单原子催化剂的活性中心与构效关系研究

学生姓名：孙丽

水煤气变换（WGS）反应是氢能净化和应用的重要一环，单原子催化剂在该反应中表现出优异的性能。该论文以不同类型活性载体负载的单原子贵金属催化剂为研究对象，探索水煤气变换反应中单原子金属与载体的“主客”关系，揭示催化剂的作用机制与构效关系，选题具有重要的科学意义。取得的成果如下：

1. 制备出可还原氧化物负载的单原子催化剂（ Ru_1/FeO_x ），表现出较高的 WGS 活性、选择性以及稳定性。发现 Ru_1 上 CO 吸附较弱并且促进 FeO_x 氧空位的产生，提出基于 Ru-O-Fe 的双活性位协同作用是催化剂较高性能的主要原因。

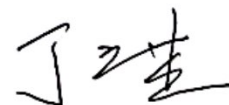
2. 制备出碳化物负载的单原子催化剂（ $\text{Ir}_1/\alpha\text{-MoC}$ ），实现 150 °C 时 CO 转化率接近 100%。发现 $\alpha\text{-MoC}$ 是主要活性位， Ir_1 作为单原子助剂调节附近 Mo 位的电子结构，进而提升 WGS 反应活性。

3. 发现单原子催化剂的助剂效应可以拓展至 $\text{M}_1/\alpha\text{-MoC}$ （ $\text{M}=\text{Rh}, \text{Pd}, \text{Pt}$ ）催化剂，促使 $\alpha\text{-MoC}$ （100）面上 Mo 位为活性中心；当 M 为 Au 时，单原子 Au 可作为主活性位点参与反应。

上述研究结果具有创新性。

论文工作量大、结构清晰、撰写规范、表达清楚、实验数据分析合理，结论可信；答辩过程中，思路清晰，表述清楚，能正确回答问题，表明作者具有扎实的基础理论知识与专业素养，具备独立开展研究工作的能力，达到了博士学位论文要求。经答辩委员会无记名投票表决，全票通过论文答辩，建议授予孙丽同学工学博士学位。

答辩委员会主席（签字）：



2022 年 11 月 20 日