



# 化物生活

HUA

WU

SHENG

HUO

中国科学院大连化学物理研究所

第9期

(总793期)

2015年4月10日

## 3万吨/年乙醇胺临氢氨化制乙撑胺装置顺利投产



近日,由DNL0805组和DNL0807组提供催化技术和工艺包建设的3万吨/年乙醇胺临氢氨化制乙撑胺装置,在山东联盟化工股份有限公司一次投料开车成功,生产出合格的乙二胺等主副产品。

2011年,依托我所研发的乙醇胺临氢氨化专利技术建设的1万吨/年工业化装置在山东联盟成功投产并连续平稳运行,创造了较好的经济效益,在此基础上企业决定新建3万吨/年乙撑胺工业

化装置。该装置的顺利投产再次证明,我国已完全掌握国际先进的乙撑胺成套工业化生产技术。

乙撑胺的主产品乙二胺主要用于农药、医药和多种化学助剂的生产,世界年消耗约45万吨。我国对乙撑胺的消耗量以5-10%的年增加量在迅速增长,2011年以前我国消耗的乙二胺主要依靠国外进口。乙醇胺临氢氨化技术是一种清洁的乙二胺绿色生产技术,我国企业一直对该技术有着强烈的需求,但该核心技术长期以来一直被国外少数公司掌握并垄断,拒绝向其它公司转让,导致我国消耗的乙撑胺长期依赖进口。我所技术的成功应用对打破国际垄断,对保障我国相关行业的健康发展起到积极作用。

(文/丁云杰 图/联盟化工)

近日,分子反应动力学国家重点实验室韩克利研究员和邓伟侨研究员等基于 $\pi$ 堆积体系中电荷迁移理论方法的研究取得新进展,相关结果在日前出版的《自然实验手册》(Nature Protocols 2015, 10, 632-642)上发表,题为“Quantitative prediction of charge mobilities of  $\pi$ -stacked systems by first-principles simulation”。

$\pi$ 堆积体系在自然界中广泛存在,比如有机半导体、液晶和DNA双螺旋结构等。由于体系中存在较强的 $\pi-\pi$ 耦合,因此体系中电荷迁移较为容易。利用这一特性, $\pi$ 堆积体系常应用于电子器件中,比如有机半导体晶体管,DNA分子导线等。不同于传统的半导体体系,有机 $\pi$ 堆积体系的电荷迁移服从跃迁机制,因而常规的半导体理论方法无法用于描述其电荷迁(下转二版)

4月4日,石墨烯二维材料的发明人之一、2010年度诺贝尔物理学

奖获得者、英国曼彻斯特大学Konstantin Novoselov教授应邀来我所交流访问。Konstantin Novoselov教授也是我所和厦门大学等共同组建的“能源材料协同创新中心”的荣誉杰出教授。

上午,Konstantin Novoselov教授先后参观了我所催化基础国家重点实验室、分子反应动力学国家重点实验室、直接醇类燃料电池研究组、低碳催化与工程研究部以及纳米与界面催化研究组等,与我所科研人员和学生就表面化学、光催化、催

## 诺贝尔物理学奖得主Konstantin Novoselov教授来所交流访问



化新材料以及分子反应动力学等相关问题进行了深入的探讨和交流。期间,他还接受了我所英文网站主编M. Donna博士

的采访,称赞大连化物所是一个非常优秀的科研单位,研究队伍、科研氛围和研究条件都是世界一流的。

下午,Konstantin Novoselov教授在能源基础楼一楼会议室做了题为“Materials in the Flatland”的能源基础论坛讲座。报告由包信和院士主持,副校长杨学明代表我所致欢迎辞。副校长刘中民,李灿院士,以及我所和来自大连理工大学的300余名科研人员和学生参加了报告会。

(文/姜秀美、刘会娟 图/任兰会)

电荷迁移理论方法研究成果在《自然实验手册》发表

# 我所参加院基层党组织书记集中轮训启动仪式暨首场培训视频会

日前，中科院在京举办全院基层党组织书记集中轮训启动仪式暨首场培训视频会。我所在能源基础楼会议室设分会场，党委书记王华以及各党支部书记30余人参加了会议。

会上，院党组成员、院副秘书长何岩作动员讲话，对全院各级党组织及其队伍构成情况进行了系统分析，对集中轮训提出明确要求。接着，会议邀请了中央党校党建教研部副主任张志明教授就“学习习近平总书记关于全面从严治党的重要论述”作了专题报告。报告从“为什么要全面从严治党、如何全面从严治党、全面从严治党的创新与意义”等三个方面详细解读了新形势下党中央全面从严治党战略部署。

报告结束后，与会人员围绕辅导报告内容，围绕如何推进从严治党、加强领导干部作风建设、在新形势下如何做一名合格的基层党组织书记等进行了热烈地讨论。大家表示报告振奋人心，让人受益匪浅，对党中央全面从严治党的战略部署有了更深的认识，也增强了进一步把支部工

作做好的信心；大家还结合党支部工作实际谈认识、谈感受，通过交流学习，既认识到了支部工作中的差距不足，又找到了今后支部工作新的切入点，大家表示今后工作中将进一步结合我所各项工作实际，通过支部“率先行动”，助推“率先行动”计划的实施。

王华在总结讲话中对如何做好支部书记提出要求。他指出：党支部书记要具有强烈的使命感和责任感，勇挑重担，不怕困难，决不能辜负党委和全体党员的信任。同时，在实际工作中要掌握方式、方法，充分发挥党支部的战斗堡垒作用，找准党支部工作服务中心工作的切入点，积极主动为本部门或单位分忧解难。通过提升个人业务能力和人格魅力，不断提高党支部书记的威信，不断提升党支部的凝聚力和影响力。

会议最后，王华传达了所党委2015年工作要点，对2015年重点工作做出了部署。

(高杨)



4月3日清晨，在清明节即将到来之际，我所在所区内组织开展了瞻仰张大煜先生塑像活动。我所职工和研究生在上班和上学的途中，纷纷停下脚步，来到张大煜先生塑像前送上一支鲜花，以此深切缅怀著名物理化学家、我国催化科学的先驱者之一、我所创始人之一——张大煜先生，寄托我们的哀思。

在随后举行的瞻仰仪式上，现场的100余名职工和研究生向张大煜先生塑像鞠躬致敬，团委委员向塑像敬献了花篮，团委书记关佳宁在主持中简要介绍了张大煜先生的生平，并号召大家沿着以张大煜先生为代表的老一辈科学家的足迹，开拓进取，勇攀高峰，为把我所率先建成世界一流研究所贡献力量。

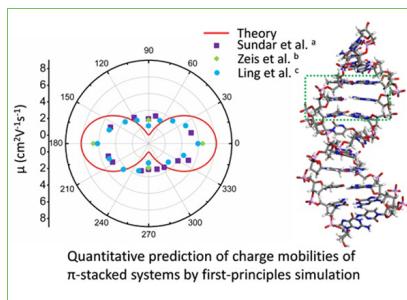
本次活动得到全所人员的广泛关注和热情参与，共有包括所领导、院士在内的400余人参加了瞻仰活动。

活动后，所团委还来到位于英雄纪念公园张大煜先生及其夫人的墓地进行祭奠。

张大煜先生作为我国催化科学的先驱者之一，为催化科学的发展和中国化学工业做出了卓越贡献；张大煜先生也是我所的创始人之一，曾于1952年至1968年任我所所长，对我所的创建和发展倾注了毕生的心血。他以国家利益至上，坚持真理、不断求索、谦逊严谨、不计得失的品格和美德，为我们留下了一代宗师的光辉形象，并在化物所人心中塑造了一座精神的丰碑。今年是张大煜先生诞辰109周年，也是张大煜先生塑像在我所落成的第13个年头。每年清明时节，所内人员都会怀着无比崇敬和怀念的心情瞻仰张大煜先生塑像并敬献花篮。

(文/孙洋 图/刘万生)

## 电荷迁移理论方法研究成果在《自然实验手册》发表



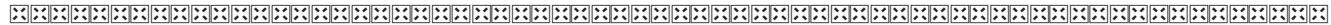
(上接一版)移行为。而且由于有机分子的多样性，有机 $\pi$ 堆积体系也种类繁多。如何从上百万种可能中找到所需性能的有机 $\pi$ 堆积体系是这个领域的关键问题。而一个能够准确定量预测有机 $\pi$ 堆积体系电荷迁移的理论方法是解决这一关键问题的核心。

2009年，该研究团队提出一套理论

方法，结合Marcus理论和量化计算，能够较为准确预测有机半导体各相异性的载流子迁移率(*J. Phys. Chem. B* 2009, 113, 8614)。经过几年发展，逐步完善了理论体系，预测了一系列有机半导体中电荷迁移的规律(*Chem. Commun.* 2010, 46, 5133; *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2010, 12, 9267)。基于这些前期工作，该成果提出进一步完善的理论方法，做到仅根据 $\pi$ 堆积体系的晶体结构就能预测该体系的载流子迁移率，得到的预测结果与实验结果有很好的吻合。这个成果为用计算机大规模筛选所需性能的 $\pi$ 堆积体系打下坚实基础。

这项工作得到国家自然科学基金委,973计划的大力支持。(孙磊)

**我所举行瞻仰张大煜先生塑像活动**



## “落实‘率先行动’计划，率先建成世界一流研究所”专栏(3)

### 夯实人才工作基础，助力我所“率先行动”计划实施

◎ 人事处 孙军

2013年7月，习近平总书记对中科院提出了“四个率先”的科技发展要求，为我院深入做好科技体制改革指明了方向。2014年8月，我院提出的“率先行动”得到党和国家领导人的高度评价，随即我院全面启动“率先行动”相关工作。研究所分类改革是“率先行动”的核心，必将关系到方方面面各类人员的切身利益，而且“四个率先”的目标明确要求“率先建成国家创新人才高地”，因此做好人才人事工作是完成“率先行动”重要内容和坚实保障。目前，随着我院“率先行动”工作的全面展开，我所分类改革的方向与目标逐渐明确，为确保我所相关改革工作的顺利开展，人才人事应重点做好以下几个方面工作：

**1、完善健全人才人事制度，为顺利完成“率先行动”提供制度保障。**研究所分类改革是当前“率先行动”的工作重点，这就要求我们要认真学习、熟悉了解我所相关工作的重点和核心，掌握改革将会对各类不同人员带来的影响和冲击，同时紧密围绕研究所改革中心工作，统筹考虑不同层

面人员的实际情况，不断调整各类人才人事体制，保障各类人员的权益，及时增补、修订、完善相关制度，及时为研究所的改革工作提供制度保障，以确保相关工作切实、高效开展。

#### 2、持续引进国内外高水平人才，为我所加强相关学科领域发展提供人才储备。

科技工作的主体是科技工作者，随着我所科研事业的不断发展，研究所科技发展的不断凝练，我所对重点科研领域的高水平科技人才的要求不断提高、需求不断增加。一方面我们要按需设岗、按岗招人，集中资源加强对重点学科领域高水平科技人才的引进；同时我们也要积极思考，积极探索，尝试借鉴国内外顶尖学府的人才引进机制，营造更好的人才引进环境和氛围，吸引在国内、国际具有相当影响力的高水平科学家来所创新创业发展，通过高层次人才的持续引进，建立、加强我所在相关学科的学术地位和国际影响力。

#### 3、加强对在所工作各类人才的培养，为我所建成相关学科的人才高地夯实人才基础。

对于不同年龄、不同层次的科技

工作者，有针对性地进行培训和培养，为各类人才的发展，尤其是青年人才的发展创造更好的条件，提供更好的发展平台和发展机遇，不断完善、打造研究所的人才梯队建设，使有实力、敢担当的青年人才能够更快、更好地脱颖而出。优秀的青年科技人才是研究所的未来，科学、完善、坚实的人才队伍储备是实现建成人才高地的重要保障。

#### 4、充分调动各类人员的积极性，保障我所高效、圆满完成“率先行动”各项工作。

中科院、研究所的改革必将涉及到各个层面的不同人员，人才人事制度的改革必须考虑到各类人员的利益，因此在修订相关工作制度之前要做好全员的调研工作，考虑到各个阶层的利益，充分吸纳各个方面意见和建议，让更多的人参与到改革的各项工作中，理解、支持改革的重大利益，进而会大大提高工作效率，保障各项改革工作顺利实施和推进。

人是改革工作的设计者和执行者，也是执行对象，也是各项改革工作的动力源。做好人的工作，是圆满完成“率先行动”工作的重要任务和内容，协调、组织好人的工作将大大提高改革工作的效率和效果。人的工作涉及到每个人的切身利益，复杂而多变。改革不可能保证每个人都获益而不受损，如何兼顾“率先行动”顺利实施和不同层面各类人员的利益，在实现“大我”的同时，保全“小我”，需要每一个人贡献智慧。多一分参与、多一分力量、多一分理解、多一分支持，将有利助推我所率先完成“率先行动”。

实现“四个率先”目标，是我国加快科技创新步伐、实施创新驱动发展战略的现实要求，也是建设世界科技强国、实现中华民族伟大复兴中国梦的时代要求，是党和国家赋予我们科技工作者的光荣使命，既是重大科技任务，也是重大政治任务。

**“率先行动”是期望，是中央的期望与国家的需要。**当前，创新型国家建设已进入决定性阶段，我国经济发展模式转变迫在眉睫，改革开放进入深水区。我院也正处于突破发展瓶颈、实现创新跨越的关键时期。从经济发展领域来看，我国经过30余年的改革开放，粗放的经济发展模式虽然较快地促进了经济的发展，但同时对环境、资源和社会都提出了更加严峻的考

### 期望、机遇与挑战

◎ DNL08 马怀军

验。世界经济的竞争，是当今世界舞台上一个非常突出和普遍的现象。科技的创新和率先突破是经济竞争的制高点，也是一个国家综合国力竞争的制高点。为了促进科技发展，党的十八届三中全会作出了全面深化改革的重大决定，对深化科技体制改革提出了新的任务和要求。习近平总书记、李克强总理等党中央、国务院领导同志对《中国科学院“率先行动”计划暨全面深化改革纲要》（简称《“率先行动”计划》）作出重要批示，进一步强调了实现“四个

率先”目标的重大意义和重要任务，并对我院认真组织实施、全面深化改革提出了明确要求。

**“率先行动”是机遇。**先进的体制不一定就能产生先进的事业，但落后体制肯定不能产生先进的事业。“率先行动”提供了新的机遇，通过全面深化改革，激励不同类型的科技工作者为科技创新努力工作。知识创新工程以来，我院在促进跨所跨学科联合合作、发挥多学科综合优势组织开展重大创新活动方面，进行了（下转四版）

(上接三版)一系列改革探索,也积累了很多经验。但一些研究所仍然存在“大而全”、“小而全”的现象,科研工作低水平重复、同质化竞争、碎片化扩张等问题难以有效纠正,不利于培育和增强核心竞争力,不利于组织协调和承担重大科技任务,不利于做出重大创新贡献。不从根本上突破这些体制机制上的瓶颈,改革就难以深化,发展就迈不开步伐,跨部门、跨单位、跨学科联合合作就难以有实质性进展,“四个率先”的目标就无法实现。《“率先行动”计划》以研究所分类改革为突破口和着力点,在分析总结我院历史上体制机制改革经验的基础上,着眼于国家战略科技力量的定位,遵循不同性质科研活动的规律,提出对研究所进行分类定位、分类评价、分类管理的改革思路,旨在从根本上突破体制机制壁障,清除各种有形无形的栅栏,打破各种院内外的围墙,着力开辟“政策特区”和“试验田”,让机构、人才、装置、资金、项目都充分活跃起来,形成创新发展的强大合力。同时,带动和促进其他方面的改革创新,逐步构建具有我国和我院特色的现代科研院所治理体系。

## 期望、机遇与挑战

◎ DNL08 马怀军

**“率先行动”是挑战。**中国科学院院长白春礼在2014年7月份接受专访时谈到:“作为科技国家队,从总体上看,目前我院正处于历史上最好的发展时期,在学科体系、创新潜力、创新队伍、组织架构、科研条件等方面,初步具备了实现‘四个率先’、引领我国科技实现跨越发展的基础和优势。但也要看到,与国家重大战略需求和世界先进水平相比,我院的创新能力还存在较大差距,实现‘四个率先’目标还面临诸多挑战。”

我所在我院是一个非常独特的综合性研究所,学科多样、交叉性强。以什么样的方式进入率先行动是我所面对的首要问题,既要考虑我所的历史与现状,又要全面考虑后续的发展。在深刻认识实施《“率先行动”计划》的重要性、必要性和紧迫性的基础上,要深入理解我所特

点,不断增强改革的主动性、创造性。同时要立足大局、目光长远,深刻认识改革的艰巨性和复杂性。要开展广泛深入动员,引导广大职工、党员正确认识改革发展稳定的关系,正确认识研究所分类改革与“一三五”规划、战略性先导科技专项等重点工作关系;引导广大职工、党员把全面深化改革举措与日常工作紧密结合起来,将我所“率先行动”计划的相关重点任务和改革举措,细化落实到日常工作中去。为全面促进我所科技工作发展、为国家社会发展贡献力量而努力工作。

“率先行动”计划是国家对广大科技工作者的殷殷期待,又是科技工作者奋发进取的重要机遇,更是严峻挑战。机遇与挑战同在,我所领导必定深刻分析当前局势、考量研究所发展大计,为研究所的健康发展谋得长远之计。

## 致化物所人——让我们率先行动起来

◎ 二室 廉应江

当时光在那片黑土地上荏苒,  
当岁月在青葱的树林间变迁,  
当丛丛脚步在知心路上走远,  
当往事在更迭轮回的光阴中沉淀。  
在这样一个创造神奇的院子里面,  
在这样一群开拓奋斗的人们中间,  
总有一种百转千回的感动萦绕心田,  
总有一段刻骨铭心的记忆令人怀念。

筚路蓝缕,创新维艰,  
六十五年前的一个春天,  
有这样一群满怀理想的人,  
秉承求实创新的科研态度,  
从五湖四海来到美丽的海滨之畔,  
走进简陋而又狭小的实验室,  
他们将科学的种子,  
撒在了这片辽阔的黑土地,  
从那时起,  
梦想之舟从这里扬帆,

激情之火在这里点燃。

上下求索,长路漫漫,  
春去冬来,  
有这样一群执着的人,  
将科学创新推向了崭新的起点,  
从浩如烟海的资料文献,  
到严格复杂的论证试验,  
从繁忙有序的实验室,  
到硕果累累的工厂车间,  
他们不畏艰险、迎难而上、勇往直前,  
他们历经风雨、激流勇进、无悔无怨。

砥砺前行,任重道远,  
为了那青山绿水,  
为了那碧草蓝天,  
让我们率先行动起来,只争朝夕!

正是有这样一群开拓的人,

他们埋头苦干、攻坚克难,  
正是有这样一群创新的人,  
他们求真务实、勇攀高峰,  
耕耘在科学创新的春天,  
从实验室到航空航天,  
从实验室到绿色奥运,  
从实验室到洁净能源,  
从实验室到生物技术,  
科研创新的脚步在这里不断前进,  
求真务实的科研理念在这里薪火相传。

正是这样的一群人,  
他们历经了几十年的风霜雪雨,  
他们见证了几十载的沧海桑田。  
他们用汗水,  
浇灌着我们美丽的家园,  
他们用奋斗,  
抒写着雄伟豪迈的诗篇,  
他们的故事,  
将在这片海滨之城永远流传。

