

化

物

生

活

2011

海外版



http://www.dicp.ac.cn
TEL: +86-411-84379163
FAX: +86-411-84691570

总第 4 期

Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences

新春献辞

所长 张涛



E-mail: taozhang@dicp.ac.cn

一元复始、万象更新。值此辞旧迎新之际，我谨代表所领导班子向曾在我所学习、工作过，现在海外学习、工作的人士，向现在海外短期学习和工作的我所职工，向离退休后居住在海外的我所人士，以及海内外给予我们支持、关怀的各界人士，并通过你们向你们的家人，致以节日的问候和美好的祝福！祝你们在新的一年里健康平安、事业进步、阖家幸福！

2010年，是不平凡的一年，是欢乐与艰辛并肩的一年。在这一年中，全体化物所人面对挑战，以坚忍不拔的决心，吃苦耐劳的作风，从容不迫的气度，智慧果敢的决断，在化物所的历史上共同书写下了新的一页。

在2010年，在全所上下的共同努力下，我所的科研工作取得了新的成绩。多项基础研究取得新进展，其中纳米限域研究和化学反应中的分波共振研究工作分别在 Science 发表。多项应用研究取得突破，世界首套 DMTO 工业装置投料试车一次成功，第二代技术通过了成果鉴定，MTO 团队获得“中国科学院先进集体”称号；化学激光工作取得重大进展，多个项目以优异的指标通过了总体单位验收；航天催化与新材料研究团队获得“中国科学院杰出科技成就奖”。

2010年，我所人才队伍建设又有新的突破。我所荣获“中国科学院人才工作管理先进集体”称号；获批引进国家“千人计划”人选3名（Gilson、Periana、张宗超教授）；杨学明研究员荣获长江学者成就奖、陈嘉庚科学奖；8人入选中国科学院“百人计划”、7人获择优支持。

2010年，我所多个 863、973 计划项目通过验

收；全年共申请专利 355 件，授权 143 件；根据日前发布的中国科技论文统计结果，2009 年度 SCI 收录我所文献 447 篇，居全国研究机构第 6 位，2 篇论文当选“2009 年中国百篇最具影响国际学术论文”；另外，还有两位研究生的论文当选“2010 年全国优秀博士学位论文”，多名师生获得中国科学院院长特别奖、院长优秀奖和优秀导师奖；由我所主办的学术期刊《色谱》在中国化学类 34 种核心期刊中影响因子排名第一。在此，我代表大连化物所对大家的不懈努力表示衷心的感谢！

一直以来，所班子始终坚持通过各种方式，努力改善我所科研、学习、生活的空间和环境。这一年来，我们吸引了更多国际一流学者来所进行学术交流，授课讲学；我们加大力度推进出访交流，同时在所内召开了多个有重要影响的国际会议；

今年有多家企业公司在我所设立了丰厚的奖学金，我所研究生的奖助学金有了大幅提高，目前已处国内前列；2010 年，新研究生大厦完全投入使用，能源楼已建成并分批投入使用，有关研究组正在紧锣密鼓地进行入驻准备，长兴岛园区建设已正式动工；特别是今年 8 月，我所组织召开了“创新 2020”发展战略研讨会，共同探讨了我所未来发展的方向、目标、原则和重大举措等问题，提出了我所未来十年的发展总目标，完善了我所科技发展战略，为“创新 2020”的实施营造了良好的思想基础和环境氛围。这些都为我所进一步提高科技创新能力和核心竞争力奠定了良好基础。

新的一年，是国家“十二五”规划开始实施的第一年，也是中国科学院“创新 2020”的开局之年，让我们团结一心、把握机遇，科学谋划、顺势而上，为把我所早日建成世界一流研究所努力奋斗，为建设“创新型国家”做出我所应有的贡献！

最后，祝愿大家在新的一年里，每天都有新快乐，每天都有新收获！



2010 年 12 月 27 日晚，由研究生会和研究生部主办的“兔翰驭长风——大连化物所 2011 元旦晚会”在所礼堂举行。500 余名师生共聚一堂、同庆佳节。



2010 年度重大科研成果(之一) |||||

甲 醇 制 烯 烃 技 术 的 研 究 与 开 发



2010 年 10 月 26 日,由我所自主研发的“新一代甲醇制取低碳烯烃工业化技术”(DMTO-II)在北京钓鱼台首签工业化示范项目许可



“煤代油制烯烃技术迈向产业化”入选 2010 年中国十大科技进展新闻

乙烯丙烯是重要的基本化工原料,目前主要从石油路线制得。我国石油资源匮乏,煤炭资源相对丰富。发展以煤为原料制取乙烯丙烯等石化产品的现代煤化工技术,是我国能源战略的重要内容。煤制烯烃包括煤气化、甲醇合成、甲醇制烯烃等多个步骤,其中煤制甲醇为成熟技术,甲醇制烯烃则是待开发的关键核心技术。

大连化物所从上世纪八十年代开始开展甲醇制烯烃技术研究,先后得到了中科院、国家重点科技发展计划、国家“973”计划以及国家重大产业开发专项支持。“七五”期间完成了 300 吨/年(处理甲醇)固定床中试。“八五”期间研究重点转向新型 SAPO 催化剂和流化反应工艺的研究,并完成了中试放大试验。1995 年底通过鉴定,1996 年获得中科院科技进步“特等奖”。

2004 年大连化物所与陕西新兴煤化工公司、洛阳石化工程公司合作,进行了甲醇制烯烃工业化成套技术 DMTO 的开发。2005 年建成了世界上首套万吨级甲醇制烯烃工业化试验装置,同时成功地进行专用催化剂的放大制备。2006 年完成工业化试验,取得了甲醇转化率 ~ 100%,乙烯 + 丙烯选择性 ~ 80%,吨烯烃甲醇单耗 2.96 吨的结果。2006 年 8 月通过了中国石化协会组织的鉴定,认为“装置规模和技术指标处于国际领先水平”。

2008 年获辽宁省科技进步一等奖。

2006 年底,国家发改委核准了神华集团包头 60 万吨/年煤制烯烃项目采用 DMTO 技术,建设世界首套甲醇制烯烃工业装置。该项目于 2010 年 5 月建成,8 月 8 日首次投料试车成功,并分别于 8 月 15 日和 21 日生产出世界上第一批煤基聚丙烯和聚乙烯树脂颗粒。目前神华包头 DMTO 装置已经满负荷商业运行。

为进一步提高低碳烯烃的产率,保持 DMTO 技术的核心竞争力,大连化物所又开发了甲醇制烯烃第二代技术 DMTO-II。DMTO-II 技术使用同一催化剂实现甲醇转化和其产物中的 C_4 以上重组份的再转化两个反应,可以更加合理利用热量,烯烃收率更高。2010 年 5 月,DMTO-II 工业化试验在陕西华县通过 72 小时现场考核,结果为甲醇转化率 99.97%,乙烯 + 丙烯选择性 85.68%,吨烯烃甲醇单耗 2.67 吨。如果加大 C_4 回炼量,乙烯和丙烯的总收率将进一步增加。6 月 26 日,DMTO-II 技术在北京通过了中国石化联合会组织的鉴定,认为是“甲醇制烯烃技术的又一次创新,技术指标达到世界领先水平”。10 月 26 日,首套 DMTO-II 商业装置的技术许可在北京签订,陕西蒲城能化成为第一个用户。

为了表彰以刘中民研究员为首的 DMTO 研发团队的突出成绩,2010 年度甲



甲醇制烯烃(DMTO)工业性试验装置

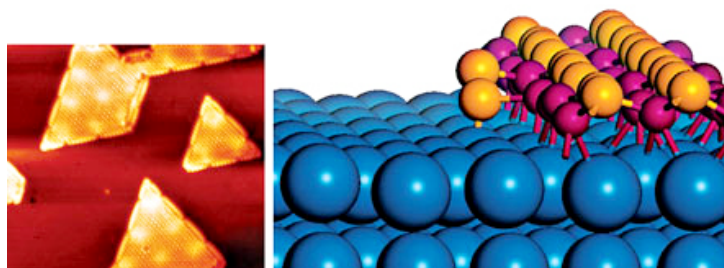


神华包头 180 万吨/年甲醇制 60 万吨/年烯烃装置

醇制烯烃国家工程实验室被授予“中国科学院先进集体”的光荣称号。“煤代油制烯烃技术迈向产业化”被中国科学院和中国工程院联合评为 2010 年“中国十大科技进展”。

2010 年度重大科研成果(之二) |||||

催化基础理论研究取得重要突破



FeO-Pt(111)表面活性位的STM图像(左)和模型结构图(右)。Pt, Fe 和 O 原子分别用蓝色、紫色和棕黄色小球表示

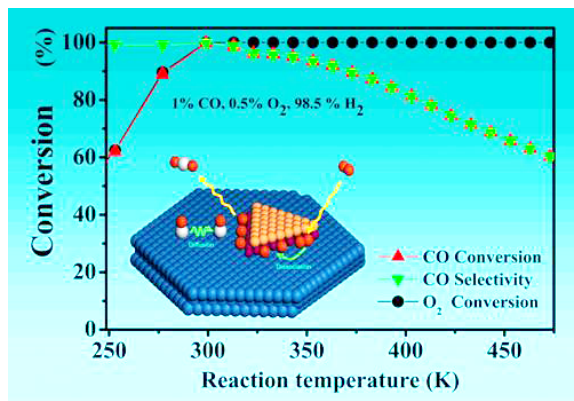
纳米结构限域的配位不饱和金属原子是众多酶催化和均相催化反应的活性中心。在负载型多相催化体系中,实现可控制备具有类似酶结构特征的高效、稳定的活性中心,对多相催化发展具有十分重要意义,也是对催化基础理论研究的一个巨大挑战。我所催化基础国家重点实验室纳米和界面催化研究组傅强、马丁和包信和,与理论催化研究组李微雪等研究人员合作,借助贵金属表面与单层氧化亚铁薄膜的强相互作用所产生的界面限域效应,成功地构建了表面配位不饱和亚铁结构。这种界面限域的亚铁活性中心与金属载体协同作用,在分子氧的低温活化过程显示出非常独特的催化活性,应用于富氢气氛下一氧化碳(CO)选择氧化,在质子膜燃料电池(PEMFC)实际工作条件下(60-80度,水蒸气和CO₂存在),成功地实现了燃料氢气中微量CO的高效去除(Science 2010, 328, 1141-1144)。

众所周知,CO在贵金属表面有很强的吸附作用,阻塞了表面反应的活性位,从而导致CO中毒。在大量涉及贵金属催化的反应体系中,微量CO的存在就会导致催化剂的迅速失活。我们的研究发现,在贵金属铂表面可以实现可控生长2~5纳米大小的规整单层氧化亚铁(FeO)岛,在这些纳米岛边缘形成一种配位不饱和的亚铁活性中心。采用基于第一性原理的密度泛函理论对这一实验结果进行理论研究,发现单层氧化亚铁的稳定存在来源于Fe与Pt表面的强相互作用,并通过这

种氧化物与金属界面的限域效应稳定了纳米岛边界上的亚铁活性中心,这些活性位对分子氧具有较强的吸附能力(吸附能为-1.53 eV),但不吸附CO,从而解决了CO的中毒问题。进一步计算研究表明,吸附在CUF中心的分子氧在几乎不需要活化能的情况下便能迅速解离,生成高活性的原子氧物种,完成催化氧化反应。由基础研究得到的概念推广可以到真实催化剂的创制过程,我们成功地制备出了SiO₂负载的粒子尺寸在2~4纳米左右的Pt-Fe催化剂,用于氢气中微量CO的催化脱除反应。当原料气的配比(CO:O₂:H₂)为1:0.5:98.5时,在室温条件下,

CO的转化率和氧分子氧化CO的选择性均达到100%。将该催化剂应用到质子交换膜燃料电池燃料气氢气中微量(30 ppm)CO脱除的实际过程,在燃料电池真实操作条件下(60-80度低温,25%CO₂和15%水蒸汽),成功地实现了CO完全脱除(<1 ppm)。

在这一高效的催化体系中,贵金属铂除了提供CO吸附位之外,另一个非常重要的作用就是像生物酶中的蛋白配体一样,通过与铁的强相互作用提供了一种纳米界面限域机制,稳定了具有高活性的



尺寸在2~4纳米左右的担载Pt-Fe催化剂用于氢气中微量CO的催化脱除反应。当原料气的配比(CO:O₂:H₂)为1:0.5:98.5时,在室温条件下,CO的转化率和氧分子氧化CO的选择性均达到100%



多功能纳米探针系统用于Fe-Pt(111)模型表面研究。集成了STM、XPS、UPS、HREELS和MBE等方法和技术

CUF结构,并在反应中实现了催化循环。依据这一概念,我们正在进一步寻找合适的衬底材料,使其能发挥与贵金属铂类似的功能,从而实现这类催化剂中贵金属的替代。同时,由此发展起来的“界面限域催化”概念,为更深入地理解多相催化反应机制和创制新的纳米催化体系提供了重要的理论基础和科学指导。相关研究得到了国家科技部,国家自然科学基金委员会和中国科学院的持续资助,以及上海光源和合肥微尺度物质科学国家实验室的支持和帮助。

——大连化物所二〇一〇年人才工作综述

