

化

物

生

活

2012

海外版



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

总第 5 期

Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences

新春献辞

所长

张涛

值此龙年新春佳节即将到来之际,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,致以最亲切的问候、最诚挚的感谢和最衷心的祝福!

2011 年,是国家“十二五”、中国科学院“创新 2020”双开局之年。在这一年里,面对机遇与挑战,全体化物所人以“落实规划、抓好开局”为核心,向着“构建创新和谐的世界一流研究所”的目标不断迈进,各项事业都取得了令人欣喜的成绩。

2011 年,我所主持或承担的各类项目取得了新的进展。基础研究方面:催化材料的紫外拉曼光谱研究获国家自然科学基金二等奖;复杂生物样品高效分离与表征获辽宁省自然科学一等奖;四原子体系分子反应动力学和单原子催化等研究取得重要突破,相关成果分别发表在 Science 和 Nature Chemistry 上。应用研究方面:采用我所知识产权的煤制烯烃项目正式进入商业化运营,甲醇制取低碳

烯烃(DMTO)技术获得中国专利金奖和中国石油和化学工业联合会技术发明特等奖,DMTO 团队获中国科学院杰出科技成就奖;煤制天然气甲烷化技术取得新突破,中试装置连续稳定运行超过千小时;20 万吨/年液化气芳构化制高辛烷值汽油生产装置一次投产成功;化学激光、航天催化剂和燃料电池应用获得新进展等。

2011 年,我所人才队伍建设又取得新的成绩。杨学明当选中国科学院院士,包信和当选发展中国家科学院(TWAS)院士;周永贵获得国家杰出青年科学基金资助,陈萍获第 8 届中国青年女科学家奖,田志新入选国家“青年千人计划”,另有 9 人获得中国科学院“百人计划”择优支持。

2011 年,我所全年共申请专利 400 余件、授权超过 190 件,创历史新高。全年发表 SCI 论文 690 篇。根据日前发布的中国科技论文统计结果,2010 年度我所文献被 SCI 收录篇数、国际论文被引用篇数、被引次数均首次进

入全国科研机构前 3 位。1 篇论文入选“2010 年中国百篇最具影响国际学术论文”。另外,还有 3 位博士生获“2011 年度中国科学院优秀博士学位论文奖”,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 35 种核心期刊中影响因子排名第一。

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、生活的条件 and 环境。过去的一年中,我们吸引了众多国际一流学者来所进行学术交流,授课讲学。目前我所已设立多项丰厚奖学金,研究生的奖助学金处于国内前列。全所员工收入也有进一步提高。长兴岛新园区建设稳步推进,已完成第一个项目实验楼的主体工程;催化剂放大研究平台、住宅项目建设方案已确定,即将正式开工建设;金家沟园区改造正有序进行。洁净能源国家实验室(筹)也已正式启动。这些都为所事业的进一步发展奠定了良好基础。

新的一年,正向我们大步走来,时不我待,重任在肩!让我们再接再厉,为把我们所早日建成世界一流的研究所以而努力奋斗,共创大连化物所美好未来!

现任所领导简介



张涛男
现任所长

E-mail:
taozhang@dicp.ac.cn



包翠艳女
现任党委书记、副所长

E-mail:
baocyy@dicp.ac.cn



李灿男
现任副所长

E-mail:
canli@dicp.ac.cn



刘中民男
现任副所长

E-mail:
zml@dicp.ac.cn



冯埃生男
现任副所长、党委副书记

E-mail:
faish@dicp.ac.cn



王华男
现任副所长

E-mail:
whua@dicp.ac.cn



2011 年度基础研究重大成果(之一) |||||

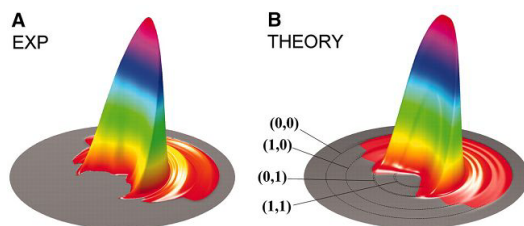
在科技部和国家自然科学基金委的资助下,我所杨学明、张东辉研究组在世界上首次对一个四原子反应体系的态-态微分截面取得了理论和实验高度吻合的研究结果。这项成果发表在 7 月 22 日出版的美国《科学》期刊上(Science 333, 440(2011))。这是分子反应动力学研究的一个重要突破,也意味着我所在分子反应动力学领域继续牢固地占据着国际领先地位。

化学反应微分截面的实验测量能够最细致地反映一个化学反应的本质特征,而通过求解在势能面上运动的原子核的薛定谔方程来得到基元化学反应的微分截面则是量子动力学理论计算的终极目标。在过去的几十年间,经过包括我所杨学明、张东辉研究组在内的科学家们的不懈努力,人们已经基本解决了三原子化学体系的量子动力学难题,能够定量地计算三原子体系的微分散射截面。然而,从三原子体系发展到更多更复杂的反应体系,则是一个巨大的挑战。作为向前发展第一步的四原子体系相对于三原子体系,体系的自由度从 3 增加到 6,这意味着无论是势能面的构造还是散射动力学的计算,从难度到计算量都有巨大的增加。譬如,对

四原子体系分子反应动力学研究取得重要突破

于势能面的计算,如果每个维度计算 100 个位点,那么四原子体系的 6 个自由度相对于三原子体系的 3 个自由度,所需计算的位点数量就增加了一百万倍!而每个位点的能量计算、势能面的拟合等的难度和计算量都因为原子核和电子数量增加而急剧增大,由此可知量子动力学理论计算从 3 原子体系发展到 4 原子体系,困难之大超乎想像。

$\text{H}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$ 反应体系是四原子反应体系的基本范例,是燃烧化学和星际化学中的重要反应,其逆反应则是选模化学的研究样板。在过去的几年间,我所杨学明、张东辉研究组对该反应的同位素替代反应 $\text{HD} + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{D}$ 进行了反应动力学研究。理论上,他们发展出一套非常有效的含时波包方法,能够对六个自由度的四原子反应进行精确的计算,同时用更精确的方法构造了该反应体系的势能面,从而完成了该体系的第一个量子态



在 6.9 kcal/mol 碰撞能下 $\text{HD} + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{D}$ 微分反应截面的实验(A)和理论(B)结果比较

分辨的全维动力学计算。实验上,他们采用高分辨的交叉分子束—里德堡氦原子飞行时间谱方法测量了 $\text{HD} + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{D}$ 在不同反应能下的微分截面及其随碰撞能的变化关系。实验结果和理论计算结果高度吻合。

该项研究成果被审稿人称为“反应动力学发展的一个里程碑”,它的发表标志着四原子态-态量子动力学时代的到来,对于多原子体系的反应动力学机理以及反应速率的研究将产生深远的影响。

(文/图 肖春雷、戴东旭)

2011 年度应用研究重大成果(之一) |||||

煤制天然气甲烷化技术取得新突破



2011 年 10 月 9 日,由洁净能源国家实验室王树东研究员领导的能源环境工程研究组自行设计完成的 5000 立方米/天煤制天然气甲烷化工业中试装置在河南义马气化厂气源条件下连续稳定运行超过 1000 小时,这是我所在煤炭洁净利用领域的又一次技术新突破。

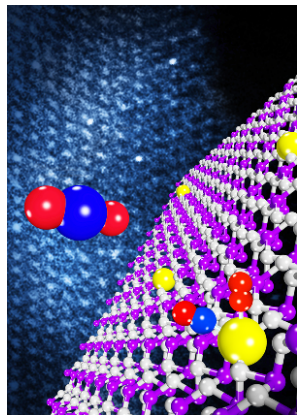
煤制天然气与其他煤化工路线相比,具有流程短、水耗少、能量效率高等优势,是我国煤炭转化的优选途径之一。尤其在在我国水资源相对紧缺、而煤炭资源非常丰富的中西部产煤大省,本路线具有更明显的技术优势和重大的推广意义。

我所科研人员历经近 5 年之艰苦攻关,成功开发出具有耐高温水热稳定性的完全甲烷化催化剂,在实验室完成了 8000 小时寿命实验。以此为基础,能源环境工程组自主设计集成了合成气完全甲烷化工业中试装置,并在河南义马气化厂工业气源条件下,圆满完成了各项技术指标。该装置的成功运行,为下一步工业应用奠定了坚实基础。

(文/曹磊 图/刘万生)

2011 年度基础研究重大成果(之二) |||||

高分散催化剂研究取得重要进展



Single platinum atoms (yellow balls and three bright spots in TEM image) on iron oxide (purple and gray) mediate conversion of CO to CO₂.

2011 年 7 月,张涛研究员领导的航天催化与新材料研究组在多年研究高分散催化剂的基础上,以氧化铁为载体成功制备出首例具有实用意义的“单原子”铂催化剂。以一氧化碳氧化和富氢气氛下一氧化碳选择氧化为探针反应,证明该单原子

催化剂具有非常高的催化活性和稳定性,其催化活性是传统纳米催化剂的 2-3 倍。该研究结果发表于 Nature Chemistry, 3,634-641(2011),并被 C&EN 作为研究亮点报道。

负载型铂催化剂是用途最为广泛的贵金属催化剂。全球每年高达 50% 的铂产量都用于汽车尾气净化系统的三效转化器。此外,燃料电池电极催化剂、石油化工中的催化重整,以及各种精细化学品的合成都大量依赖于高效的负载型铂催化剂。但是铂的资源稀缺性决定了其价格昂贵,同时铂元素独特的物理化学性质又决定了其在多种催化反应中的不可替代性。因此,如何提高铂的原子利用率一直是催化剂制备科学的核心问题之一。传统的方法是将铂分散于高比表面积的载体上,但通常只能得到尺寸在 1-10 纳米范围内的纳米粒子。研究催化剂中纳米粒子的尺寸效应也多集中在该尺度范围内。近几年随着先进表征技术(如 STEM-HAADF, XAFS)和理论计算方法的发展,极大推动

了纳米催化科学的认识,一些亚纳米尺度的催化剂已经被证明具有显著不同于纳米尺度催化剂的性能。金属分散能够达到的极限是单原子分散。但在该工作之前,还没有出现真正具有实用意义的单原子催化剂。这主要是因为单原子具有很高的表面能,在反应条件下极易与别的原子发生聚集长大。我所张涛研究员带领的研究组利用氧化铁和铂之间的强相互作用,采用简单的共沉淀法,通过精确调控沉淀条件以及控制铂的含量,获得了首个高活性并能在反应条件下稳定存在的单原子铂催化剂。通过与我所千人计划入选者刘景月教授(University of Missouri-St Louis, USA)、清华大学李隽教授、美国橡树岭国家实验室(Oak Ridge National Laboratory)Lawrence F. Allard 博士,以及上海同步辐射和北京同步辐射中心合作,证实了在该催化剂上所有的铂都呈单原子分散状态,无任何亚纳米或纳米聚集体存在。理论计算进一步揭示了铂单原子催化剂的结构和具有高催化活性的原因。

“单原子催化”对于从原子水平理解多相催化具有重要意义,也为开发低成本高效贵金属工业催化剂提供了可能。

(文/图 王爱琴)

2011 年度应用研究重大成果(之二) |||||

2011 年 9 月 7 日,广西玉柴石油化工有限公司“20 万吨/年液化气芳构化制高辛烷值汽油”生产装置一次投产成功,装置运行平稳,各项指标达到并超过技术协议及设计指标。本装置采用了我所开发的具有自主知识产权的液化气芳构化制高辛烷值汽油清洁高效催化转化技术。此项技术通过开发新型高效芳构化催化剂以及设计独特的反应工艺过程,攻克了液化气芳构化反应床层易飞温、副产干气量高及催化剂寿命短等诸多关键技术难题,为低碳烃资源的综合利用提供了新技术,对石化资源的高效利用具有重要意义。

广西玉柴石油化工有限公司向我所发来贺信,祝贺该装置投产成功。贺信中对该项工作给予了高度评价,并感谢我所

二十万吨/年液化气芳构化工业装置成功投产

科技人员在项目建设、投产和运行中提供的支持,同时表示希望进一步深化合作,为我国石化技术进步做出更大贡献。

该技术是徐龙牙、刘盛林领导的研究团队自中科院知识创新工程以来,面向国家和行业关键技术需求,继催化干气制乙苯气相烷基化和液相烷基转移优化组合技术、酞氨合成吡啶高效转化技术等开发和大规模工业

装置图



应用后的又一重大工业化成果,为石油与化学工业的可持续发展及我所应用催化学科的发展做出贡献。

(文/朱向学 安杰 图/陈福存)



DNL logo

洁净能源国家实验室(DNL)筹备已正式启动

洁净能源国家实验室(Dalian National Laboratory for Clean Energy, DNL)(筹)以中国科学院大连化学物理研究所为依托单位,成为我国第二批筹建的国家实验室之一,是我国能源领域筹建的第一个国家实验室。2006年批准,2007年开始筹建,为此,大连化物所成立了筹建领导小组和工作小组,作为研究所工作重点全力推进,2011年10月正式启动,以进一步加快国家实验室的筹建进程。

洁净能源国家实验室(筹)的基本定位是:以国家重大战略需求为导向,立足于战略层面支撑和引领能源领域的学术研究和技术研发,凝练能源领域的重大科学问题,挑战能源领域的技术难题,突出学科交叉、产学研政结合、综合技术集成、成果转化和完善体制机制,促进洁净能源相关的基础性、前瞻性、战略性科技创新。

洁净能源国家实验室(筹)面向国家洁净、安全和可持续发展的能源需求,着力发展化石能源的洁净高效利用技术、洁净能源转化技术,前瞻太阳能、生物质能和海洋能,以化学化工科学、生物学、材料学、物理学为主要学科基础,经过四年多的规划、凝练和组织,已初步建成化石能源与应用催化、低碳催化与工程、节能与环境、燃料电池、储能技术、氢能与先进材料、生物能源、太阳能、能源基础与战略、海洋能利用十个研究部和一个能源技术平台。目前,已聘任李灿院士为实验室主任、千人计划学者法国 Jean-Pierre Gilson 教授为副主任;已聘任中国科学院副院长李静海院士为学术委员会主任、包信和院士为学术委员会副主任;聘任千人计划学



程津培院士(左四)、李静海副院长(右二)、谢克昌副院长(左三)、吴登昌副省长(右三)、朱程清副市长(左二)、李灿院士(右一)和张涛所长(左一)共同按动启动球,宣布洁净能源国家实验室(筹)正式启动

者美国密苏里大学的刘景月教授为能源研究技术平台部长,其他十个研究部部长也已聘任到位,并先后引进“千人计划”4人,院所两级“百人计划”20余人。

洁净能源国家实验室(筹)主要由四大部分组成:以大连化物所能源研究为基础并联合国内高校和科学院其他研究单位,形成洁净能源 R&D 的主要力量;承担国家和地方政府的能源研发项目;并与国内能源相关企业合作,促进能源技术在国内的工业化应用;与国际能源大公司和研究机构合作,推动洁净能源技术在国际上的发展。我们通过顶层整体设计,整合优化了能源相关的催化、化工和生物技术研究方面已有的研究资源和队伍,进一步招聘人才,在洁净能源新的研究方向上部署力量,远瞻能源发展趋势,特别在洁净能源技术和可再生能源方面部署了研究方向,规划了国家实验室能源研究与技术发

展的路线图。

在科研环境建设方面,投资近2亿元的4万平方米能源化工楼已交付使用;于2009年9月落成的新研究生大厦也为研究生和博士后培养创造了更优良的条件。投资1亿元的长兴岛催化剂中试及放大平台将于2012年春季开工建设。能源技术平台总体设计已完成,公共测试研究组已成立并开始为项目研究提供支撑服务。

2011年10月DNL正式启动的仪式上,实验室学术委员会主任、中国科学院副院长李静海院士指出,洁净能源国家实验室(筹)的建设是世界范围内的一件大事,DNL定位准确,希望继续保持研发的核心竞争

力,引领国家能源发展前沿;积极探索新的模式,集成全国乃至全世界的能源技术力量。DNL主任李灿院士明确提出了分三步走的战略目标,为我国能源可持续发展提供战略咨询、创新科学思想和技术支撑、为我国经济可持续发展作出直接贡献。

我们竭诚欢迎海内外有志于能源领域及其相关学科研究的科学家以各种方式加盟/合作,实验室将提供您可与国际接轨的学术研究平台;欢迎广大的莘莘学子来实验室学习深造,实验室将为您实现科学梦想创造一流的学习和研究条件。

洁净能源国家实验室(筹)近照



——大连化物所二〇一一年人才工作综述