



中国化学科学丛书

物理化学学科前沿与展望

国家自然科学基金委员会化学科学部 组编

杨俊林 高飞雪 田中群 主编

PHYSICAL CHEMISTRY



科学出版社

内 容 简 介

本书由国家自然科学基金委员会化学科学部组织编写。80 余位我国物理化学研究领域的专家学者分别阐述了有关研究方向目前的研究现状、挑战性科学问题及未来发展趋势,在此基础上,提出我国物理化学未来应重视的发展方向与领域。全书共分十二篇,首先介绍我国物理化学“十二五”期间的发展整体规划,而后分别就物理化学中的实验方法和手段、理论化学方法及其应用、结构化学、催化化学、分子反应动力学、胶体与表/界面化学、电化学与分子电子器件、光物理与光化学、化学热力学、生物物理化学以及能源、材料、环境等相关领域中的研究内容进行了论述。

本书可供从事物理化学及相关学科的科研工作者参考,也可作为高等院校化学、化工专业及相关专业的教师和研究生的参考用书。

图书在版编目(CIP)数据

物理化学学科前沿与展望 / 国家自然科学基金委员会化学科学部组编; 杨俊林, 高飞雪, 田中群主编. —北京: 科学出版社, 2011

(中国化学科学丛书)

ISBN 978-7-03-031144-3

I. 物… II. ①国… ②杨… ③高… ④田… III. 物理化学 IV. O64

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2011) 第 093064 号

责任编辑: 周巧龙 杨 震 刘志巧 / 责任校对: 陈玉凤

责任印制: 钱玉芬 / 封面设计: 王 浩

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

中国科学院印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2011 年 6 月第 一 版 开本: 787 × 1092 1/16

2011 年 6 月第一次印刷 印张: 30 1/2

印数: 1—2 500 字数: 720 000

定价: 98.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

《中国化学科学丛书》
编委会

顾 问 (按姓名汉语拼音排序)

白春礼	柴之芳	程津培	何鸣元
李静海	林国强	王 夔	徐光宪
杨玉良	姚建年	张存浩	张礼和
张玉奎	周其凤	朱道本	

主 任 梁文平

委 员 (按姓名汉语拼音排序)

陈 荣	陈洪渊	陈拥军	董建华
杜灿屏	段 雪	高 松	高飞雪
江桂斌	蒋华良	梁文平	林国强
麻生明	孙宏伟	田中群	王春霞
王利祥	杨俊林	杨振军	张 希
张国俊	朱利中	庄乾坤	

《中国化学科学丛书》总目

- 第一卷 无机化学学科前沿与展望
- 第二卷 有机化学学科前沿与展望
- 第三卷 物理化学学科前沿与展望
- 第四卷 高分子科学学科前沿与展望
- 第五卷 分析化学学科前沿与展望
- 第六卷 化学工程学科前沿与展望
- 第七卷 环境化学学科前沿与展望
- 第八卷 化学生物学学科前沿与展望

无机化学咨询组成员（按姓名汉语拼音排序）

柴之芳 陈小明 冯守华 高 松
洪茂椿 黄春辉 计亮年 江 雷
黎乐民 刘元方 倪嘉缙 钱逸泰
苏 锵 王 夔 徐光宪 徐如人
游效曾 郑兰荪

有机化学咨询组成员（按姓名汉语拼音排序）

陈庆云 程津培 戴立信 黄志镗
蒋锡夔 李正名 林国强 陆熙炎
麻生明 宋礼成 佟振合 涂永强
吴云东 张礼和 赵玉芬 周其林
朱道本

物理化学咨询组成员（按姓名汉语拼音排序）

白春礼 包信和 蔡启瑞 陈 懿
陈凯先 付贤智 何国钟 何鸣元
侯建国 江 龙 江元生 黎乐民
李 灿 梁敬魁 林励吾 刘若庄
闵恩泽 彭少逸 沙国河 孙家钟
唐有祺 田昭武 田中群 万惠霖
万立骏 吴新涛 姚建年 查全性
张存浩 张乾二 赵东元 朱起鹤
朱清时

高分子科学咨询组成员（按姓名汉语拼音排序）

曹 镛 程镭时 黄志镗 江 明
沈家骢 沈之荃 唐本忠 王佛松
吴 奇 徐 僖 颜德岳 杨玉良
张 希 周其凤 卓仁禧

分析化学咨询组成员（按姓名汉语拼音排序）

柴之芳 陈洪渊 董绍俊 黄本立
江桂斌 汪尔康 姚守拙 叶朝辉
俞汝勤 张玉奎

化学工程咨询组成员（按姓名汉语拼音排序）

陈丙珍 陈家镛 段 雪 费维扬
郭慕孙 何鸣元 胡 英 金 涌
李洪钟 李静海 闵恩泽 欧阳平凯
沈寅初 王静康 魏可镁 谢克昌
徐南平 袁 权 袁渭康 张 懿

环境化学咨询组成员（按姓名汉语拼音排序）

傅家谟 郝吉明 江桂斌 曲久辉
孙铁珩 汤鸿霄 唐孝炎 王文兴
魏复盛

化学生物学咨询组成员（按姓名汉语拼音排序）

陈洪渊 陈凯先 计亮年 林国强
倪嘉缵 王 夔 张礼和 张玉奎
赵玉芬

《中国化学科学丛书》序

跨入 21 世纪的十年，全球政治、经济、科技格局发生了巨大变化，中国在成为名副其实的经济大国的同时，也成为科学技术研究的大国。随着中国对科学技术和基础研究投入的不断加大，随着人类对物质世界认识的不断深化，化学学科迎来了新的发展机遇。

国家自然科学基金委员会化学科学部为了全面贯彻国家科技发展中长期规划，落实科教兴国和自主创新的战略，组织化学化工领域广大专家对化学科学学科的战略地位、发展规律和特点、近年来学科发展现状与研究动态、未来 5~10 年各分支学科领域的发展布局与优先领域及重要发展方向、国际合作以及保障措施等展开了深入细致的战略调研，通过几十次不同规模的研讨会，历时两年多形成了化学学科发展战略研究报告和各分支学科的学科发展战略报告。在此基础上，组织编写了《中国化学科学丛书》。

丛书包括八卷，分别为《无机化学学科前沿与展望》、《有机化学学科前沿与展望》、《物理化学学科前沿与展望》、《高分子科学学科前沿与展望》、《分析化学学科前沿与展望》、《化学工程学科前沿与展望》、《环境化学学科前沿与展望》、《化学生物学学科前沿与展望》。

目前，全国科技界正在制定“十二五”学科发展战略与优先发展领域。我们希望能通过本丛书的出版，把科学家对化学学科及其分支学科发展调研成果提供给广大化学工作者作为参考。在丛书的编写过程中，国家自然科学基金委员会化学科学部专家咨询委员以及我国化学、化工界的科研人员对丛书的内容和相关材料曾做过多次研讨，提出了许多宝贵的建议和修改意见，在此向他们表示衷心感谢。高松院士、麻生明院士、田中群院士、张希院士和王利祥研究员、陈洪渊院士、段雪院士、江桂斌院士和朱利中教授以及蒋华良研究员分别作为无机化学、有机化学、物理化学、高分子科学、分析化学、化学工程、环境化学和化学生物学前沿与展望分册的主编科学家，对各自负责的分册付出了大量的辛勤劳动来组织编写工作，化学科学部各学科主任、项目主任及全体工作人员也为丛书的出版做出了巨大努力，在此一并表示感谢。

梁文平
2011 年 1 月

前 言

物理化学是化学乃至物质科学的基础学科之一。化学正是在 19 世纪中叶之后，随着物理化学学科的形成，才逐渐从一门完全经验主义的学科发展成一门高度定量的学科，使得人们可以在严格的理论指导下探索化学世界。物理化学以物理的原理和实验技术为基础，建立和发展化学学科的理论 and 实验研究方法，从宏观唯象到分子（原子）层次上研究物理变化（包括温度、压力、浓度、体积等）以及物理因素（如光、电、磁、声等）对化学过程的影响，由此发现并建立化学体系中的一般规律。

纵观诺贝尔化学奖颁发的一百余年的历史，与物理化学相关的化学奖占了较大的比例。由此可见，物理化学学科自身及其培养出来的人才，在重大科学发现中扮演了关键的角色。今天，物理化学秉承着不断发展的宗旨，致力于发展新的方法，理解最基本的原理，并且以深刻的洞察力来解决复杂的重大问题。物理化学不仅在化学，而且在材料、生命、能源和环境等重大科学领域中发挥着越来越不可替代的作用。

从 20 世纪 50 年代起，我国物理化学在两位卓越的化学家唐敖庆先生（1915 ~ 2008 年，理论化学家、国家自然科学基金委员会首任主任）和卢嘉锡先生（1915 ~ 2001 年，结构化学家、中国科学院前院长）的带领下，成为化学中最具影响力的分支学科之一。一大批老一辈物理化学家也为我国物理化学的发展奠定了坚实的基础。从 20 世纪 80 年代中期到 90 年代中期，我国政府在中国科学院和高校建立了 7 所物理化学及相关领域的国家重点实验室，它们成为推动物理化学发展的科研基地。

自 1986 年国家自然科学基金委员会（以下简称基金委）成立起，物理化学研究一直受到重视，在“七五”至“十一五”期间都得到重大项目的资助。基金委化学科学部为了发挥基金资助的导向作用和促进学科健康发展，经常组织专家讨论，围绕物理化学学科自身发展特点和国际科技动态，提出战略定位和发展新思路。尤为值得一提的是，基金委化学科学部组织出版了包括本书在内的 3 本物理化学学科战略发展报告专辑，近年来又召开了 3 次研讨会。

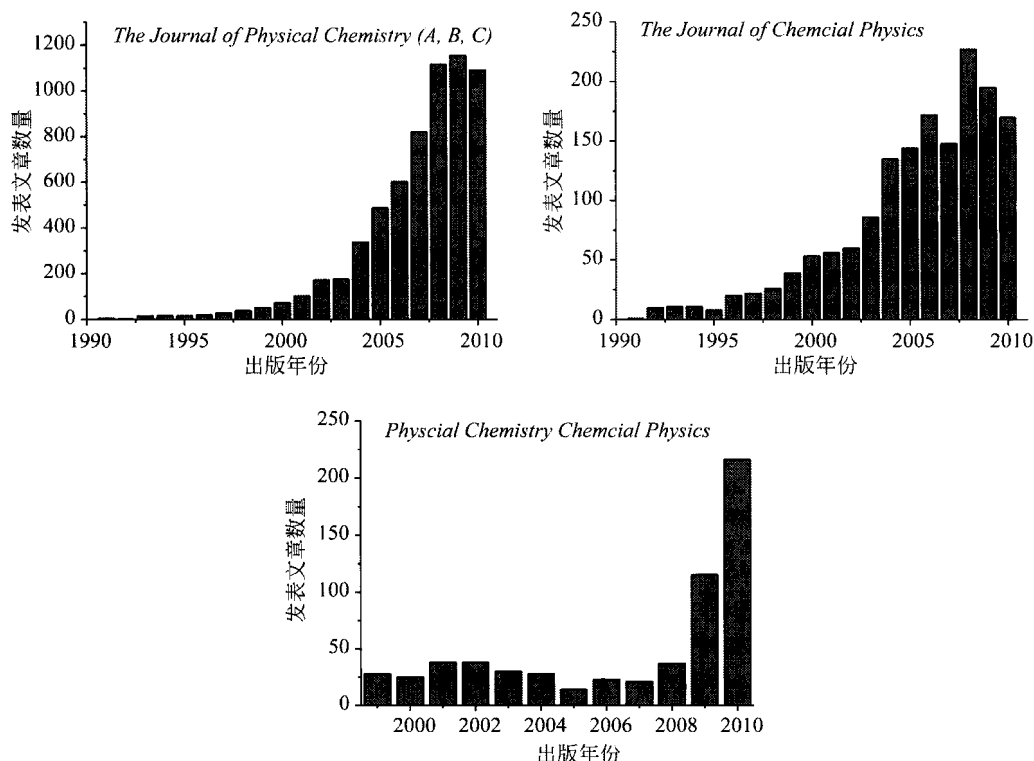
基金委化学科学部于 1994 年出版了自然科学学科战略发展报告《物理化学》专辑，于 2004 年又出版了《新世纪的物理化学——学科前沿与展望》。化学科学部原主任徐光宪先生在 1994 年出版的《物理化学》专辑的前言中强调了物理化学作为化学理论基础及重要组成学科的重要性，并指出，物理化学学科发展的趋势和特点可以概括为“宏观研究与微观研究相结合，但更多地向微观层次深入；体相研究与表面相研究相结合，但更多地向表面延伸；在微观研究的领域中，表现出静态观测与动态观测相结合，更多地向动态研究转移；理论与实践结合更为紧密，并进入更高的层次。”该专辑预测我国物理化学将于 20 世纪末或 21 世纪初，在一些重要领域达到并保持国际先进水平。

回顾《物理化学》专辑出版 17 年以来我国物理化学基础研究的发展历程，确实证实了当时的预测，我国在一些重要领域已达到国际先进水平，已经形成了若干个具有国际影

响力的研究基地和一批团队。例如,我国有3所以物理化学研究为主的国家重点实验室(固体表面物理化学、催化基础、分子反应动力学),在2009年国家科学技术部和国家自然科学基金委员会组织的评估中,因其在过去5年的杰出表现,被评为优秀实验室(即在全220余所国家重点实验室中名列前20%)。

近年来的有关统计数据显示,在国际上发表的有关化学论文数和被引用次数连续几年位列国内各主流学科之冠,高水平论文数量持续增长,国际交流合作层次也越来越高,中国化学家和中国化学学科在国际上的影响力在不断地增强。这里包含着物理化学学科的重要贡献,我国物理化学学者在国际化学界的主要组织中任职和几乎所有的主流期刊担任编委或顾问编委。

以下统计图是中国内地学者在 *The Journal of Physical Chemistry*, *The Journal of Chemical Physics* 和 *Physical Chemistry Chemical Physics* 这3大物理化学领域最著名的国际杂志上发表文章的情况。1991~2000年的10年期间,在 *Journal of Physical Chemistry* 和 *Journal of Chemical Physics* 上发表的文章数分别为266篇和201篇,而在2001~2010年,这一数字达到6050篇和1393篇,分别增长了22倍和6倍。在于1999年创刊的 *Physical Chemistry Chemical Physics* 上,2009年和2010年两年发表的文章数超过了1999~2008年发表文章的总和。



中国内地学者在国际主流学术刊物上发表论文数目的显著增加,体现了我国物理化学研究已取得了令世人瞩目的进步,已步入了全面进入国际主流研究领域的阶段。这是广大

物理化学工作者共同努力奋斗的结果,也受益于近10年来我国对于基础研究投入的巨大增长和研究队伍(特别是研究生)规模的显著增加。但是我们也应该清醒地认识到,目前具有原创性的重要研究工作还是很少,具有引领性的研究工作极少。因此,我国要从物理化学研究的大国成为强国任重而道远。

基金委化学科学部近年来分别组织了3次研讨会。2003年在东北师范大学召开了“新世纪物理化学学科前沿与发展趋势”研讨会,2006年在厦门大学召开了“物理化学发展的瓶颈与思路”论坛,2009年在复旦大学召开了“物理化学学科‘十二五’战略研讨会”。该系列研讨会的代表们围绕物理化学发展的契机和我国成为物理化学强国的发展瓶颈等问题展开了全面和深入的研讨,其中不乏激烈的争论。通过密切交流和集思广益,为我国物理化学学科的发展开拓了思路,起到了积极的引导作用,因而有必要对有关共识作一简介。

代表们指出,表面上当前物理化学甚至整个化学的作用似乎有被“淡化”和“边缘化”的趋势,因而有人认为化学正被生命科学所取代,逐渐从认知和改变客观世界的中心科学的地位退出。但是,事实上没有独立于化学物质之外的生命物质,也没有独立于化学过程之外的生命过程。没有化学的介入,特别是物理化学的参与,就无法深入了解生命的本质和进一步发展物质科学。当代科学的发展具有交叉性的大科学特征,物理化学作为化学与物理及数学的纽带,其交叉学科的特色永远不会变,其内容将日益丰富,作用将更为强大。例如,化学生物学以揭示生命运动的化学本质,发展生命调控的化学方法,提供生命研究的化学技术为基本任务,这为化学的发展带来新机遇,生物物理化学也由此成为物理化学的一个重要的新生长点。物理化学不断为化学开拓新研究领域作出不可替代的贡献。

科学新领域和新方向的开拓,往往是基于新的科学研究工具的建立和新的概念的提出,当今发展迅速的纳米科技便是一个实例,这正是以发展实验和理论方法见长的物理化学的优势所在。当今物质科学的发展迫切需要化学进一步拓宽研究层次,即从传统的、只注重研究原子层次和分子层次的反应和变化规律,拓展到分子层次以上的复杂结构体系。物理化学有望对此起到推动的作用。在研究生命、材料、环境等领域的关键科学问题和复杂体系时,需要运用各种相关的基础理论和实验技术,物理化学研究方法必然成为许多其他学科攻坚科学难关的工具库。因此物理化学也需要不断将新的在物理及其他学科中发展起来的研究手段引入到复杂体系研究中,这是物理化学学科的职责所在,也是物理化学自身发展的需要。

新的研究方法和工具也最可能协助科学家们攻克长期未解的学科难题。物理化学应用实验和理论研究手段,曾取得不少里程碑式的成就。遗憾的是,其中中国科学家所作的贡献是少之又少。这主要因为我国在建立新的研究工具和研究方法方面的意识和力量皆非常单薄,甚至对于国际上新提出的概念和新建立的方法也往往不敏感而滞后于国际同行。归结其因,可能有多方面。例如,发展新研究方法(包括实验和理论两方面)的难度大且周期长,往往需要10年或更多的时间,在目前急功近利的氛围中难以开展。数理功底深厚的老一辈物理化学家大部分已离开科研第一线,相当一部分的年轻学者迫于目前的评估压力,为了发表所谓“高档次”文章,比较忽略数理领域的新进展和新技术,而转向目前较

易发表论文的材料和纳米技术方面工作。因而，有必要形成共识，即物理化学不断发展的最重要的动力和源泉是实验和理论研究方法的创新。要潜心钻研和及时掌握数理学科的新理论和新技术，并根据化学的特点，发展相适应的理论和实验方法。

物理化学实验方法面临新的挑战而在不断发展和扩张，由此需要加强与能源、生命、材料、信息、环境等新兴学科的交叉，开发在原子、分子甚至量子水平上，具有高灵敏度、高分辨率（时间分辨、空间分辨、能量分辨），适用于复杂体系和复合体系（原位、动态、实时、在线、在体、活体）的检测手段。“工欲善其事，必先利其器”，目前亟需加强仪器设备方面的自主创新能力，着重开展基于新原理、新技术、新方法的新设备研制工作。这需要采取特殊政策引导，尽快扶持和组建包含优秀科学家和工程师的队伍，以求彻底改变我国科学仪器落后进而严重限制获得原创性成果的不利局面。

物理化学理论方法的重要发展趋势是与实验更紧密的结合。目前严格的量子化学方法已经能够对小分子体系的所有物理化学性质，如结构和反应机理等进行准确的计算。但是，实验物理化学体系和化学过程往往都十分复杂，精确求解量子力学方程已不可能。所以，理论化学与计算化学研究需要力求逼近复杂的真实的化学体系和其中发生的过程，亟待发展可以越算越大和越算越精确的方法。我国的理论化学和计算化学主要集中在现有方法和软件的常规应用上，发展理论方法的研究组较少。量子力学需要更好地结合分子力学和统计力学，发展多尺度和变尺度的新算法，并关注复杂系统的非线性、非平衡状态的行为，进而阐明物质在分子以上层次所展示的各种性质。特别需要加强对分子间的弱相互作用，如氢键、范德华力、疏水作用等的研究，认清这些弱作用力如何协同作用而形成复杂且具有新功能的自组装体系等问题。有关理论方法和模型的建立，将为整个化学科学发展注入新的动力，同时将大大促进软物质科学和生命科学的发展。

与会代表在充分肯定基金委对物理化学学科建设和科学研究的重要推动作用的同时，建议要进一步发挥基金委在机制上的引导作用，建立更科学的评价体系，根据物理化学的定位与特点，将发展新的研究方法的能力成为衡量物理化学家的创新能力的重要标准之一。对理论和实验方法学更注重其原创性，而对应用研究更注重其系统性；特别保护具有非共识和风险性较大的研究，营造鼓励原创、宽容失败和提倡交叉的氛围。物理化学的发展亟需具有创新性和批判性思维以及团队精神的人才，要引导人们突破模仿跟踪的框架，提高想象力、原创力和表现力，敢于变科学难点为热点，变基础研究的冷门为热门，进而取得一批引领性的成果。若此，我国从物理化学大国成长为物理化学强国则大有希望。

本书是在上述背景下，基金委化学科学部组织编写的第三本物理化学学科战略发展报告专辑。近年来，基金委化学科学部为国家“十二五”五年计划作学科发展规划时组织专家学者进行战略研究，由具有广泛代表性的学科专家和基金委物理化学学科管理人员经过几年的调研，撰写了学科和学科分支的发展报告，在此基础上，形成了本书的主要内容。这也是基金委组织编写的《中国化学科学丛书》系列丛书之一。

本书的第一篇中“十二五”物理化学发展展望是在基金委化学科学部物理化学和理论化学学科“十二五”发展战略规划的基础上综合撰写而成的。第二篇和第三篇分别综述和展望我国在物理化学中的实验方法和手段及理论化学方法及其应用。第四篇至第十篇涵盖了物理化学的主要分支学科，包括结构化学、催化化学、分子反应动力学、胶体化学、表

/界面化学、电化学、光物理与光化学、化学热力学等，有些文章是多个分支学科及实验和理论的交叉。第十一篇和十二篇更体现了物理化学具有交叉学科的鲜明特色，分别对生物物理化学和能源、材料、环境等相关领域中的物理化学进行了较全面的综论与前景展望。该专辑共有 75 篇文章，仍无法涵盖物理化学的所有领域和方向，但我们希望它能基本反映出中国物理化学学科的科研现状、特色和发展趋势。

本书是我国物理化学的青、中、老年科学工作者共同努力的结果。作者皆是活跃在科研前沿的物理化学工作者，包括了 50 余位国家杰出青年科学基金获得者。在此，我们谨向所有作者的辛勤工作和大力支持表示最诚挚的谢意。

田中群 杨俊林 高飞雪

目 录

《中国化学科学丛书》序

前言

第一篇 发展展望

“十二五”物理化学发展展望 《物理化学学科发展战略》撰写工作组 (3)

第二篇 物理化学中的实验方法和手段

固体核磁共振发展中的挑战性科学问题与机遇 邓 风, 杨 俊, 王 强 (29)

金属相关蛋白质的结构研究 刘扬中 (33)

催化材料合成机理的紫外及深紫外拉曼光谱研究

..... 范峰滔, 徐 倩, 冯兆池, 李 灿 (38)

针尖增强拉曼光谱技术的研究现状以及机遇和挑战

..... 任 斌, 刘 郑, 王 翔, 曾智聪, 李茂华, 田中群 (43)

手性分子的手性振动光谱研究 冯兆池, 邱 石, 李 灿 (54)

纳米尺度表/界面化学发展中的挑战性科学问题与机遇

..... 杨延莲, 裘晓辉, 王 琛 (59)

单壁碳纳米管的控制生长——现状与挑战 张 锦 (63)

第三篇 理论化学方法及其应用

理论计算化学研究进展及挑战 帅志刚 (73)

量子化学中的挑战性科学问题与机遇 黎书华 (85)

加强密度泛函理论的研究与应用 张 颖, 徐 昕 (88)

价键理论方法研究的进展与展望 吴 玮, 苏培峰 (92)

电子转移动力学和速率理论方法的发展和应用 赵 仪 (96)

构建新一代极化分子力场——开展化学、生物、界面体系的新模拟

..... 杨忠志, 赵东霞, 宫利东 (98)

粗粒化模拟方法在复杂体系中的发展动态与趋势 高靓辉, 方维海 (101)

生物理论化学中的挑战性科学问题及机遇——生物体内质能输运及信息传递机制

开发与模拟 步宇翔 (105)

演生现象的思考 邵久书 (110)

多相复杂催化反应的理论催化模拟与预测·····	刘智攀	(114)
介观体系的理论模拟·····	马 晶	(118)
分子器件的理论研究·····	杨金龙, 李震宇	(125)
马尔可夫态模型及其在分子动力学和系统生物学中的应用·····	赵南蓉, 黄旭晖	(129)
介观化学体系统计力学规律与方法的研究 ·····	侯中怀	(133)
计算化学软件——撬开化学与生命奥秘宝库之门的利器·····	于建国	(138)

第四篇 结构化学

对结构化学发展中的挑战性科学问题与机遇的一点思考·····	苏成勇, 潘 梅	(145)
金属配位功能分子中的开关效应·····	陈忠宁	(149)
多孔配位聚合物在催化中的应用——研究现状和未来发展·····	余荣民, 卢灿忠	(160)
结构化学在材料科学研究中的作用及其中的三个重要方向·····	吴新涛, 盛天录	(170)

第五篇 催化化学

绿色新路线合成沸石和介孔沸石催化材料·····	肖丰收	(177)
烃类选择氧化催化领域分子筛材料面临的挑战与机遇·····	吴 鹏	(180)
非油基资源催化转化过程中的几个挑战性科学问题·····	王 野	(184)
低碳化学的挑战与机遇——羰基合成化学·····	夏春谷, 黄汉民	(191)
若干非沸石类酸性催化剂的研究·····	贺鹤勇, 岳 斌, 华伟明, 乐英红	(197)
太阳能光解水的挑战和思考·····	宗 旭, 杨金辉, 韩洪宪, 李 灿	(201)
离子液体中的物理化学——挑战性科学问题与机遇·····	邓友全, 张世国, 张庆华	(206)
等离子体与催化·····	王安杰	(209)

第六篇 分子反应动力学

分子反应动力学研究的挑战与机遇·····	张东辉, 杨学明	(217)
分子反应动力学理论及其软件的发展·····	韩克利	(222)
锥形交叉和高维量子动力学·····	边文生	(226)
燃烧过程中的物理化学问题·····	齐 飞	(230)

第七篇 胶体与表/界面化学

关于胶体与界面化学发展的几点思考·····	郭 荣	(237)
表面活性剂溶液研究的技术介绍·····	郝京诚	(241)
分子有序组合体研究的挑战与机遇·····	阎 云, 黄建滨	(251)
胶体模板法合形成貌可控的无机微纳结构·····	齐利民	(257)

功能表面材料构建中的单分子层化学及其面临的主要挑战·····	房 喻	(263)
有机-无机杂化超分子反胶束——新的组装体系与新问题·····	吴立新	(272)
生物标记用水溶性纳米粒子的研究进展·····	杨文胜	(282)
分子的表面组装与反应研究·····	吴 凯	(288)
分子尺度下光催化分解水微观机理研究·····	王 兵, 侯建国	(296)

第八篇 电化学与分子电子器件

开放结构、高表面能金属纳米晶体催化剂·····	孙世刚, 周志有, 田 娜	(301)
重要化学电源体系及其相关基础研究的剖析与展望·····	杨 勇	(308)
锂离子电池技术的前沿与发展趋势的思考·····	夏永姚	(312)
燃料电池研究中的关键物理化学问题·····	庄 林	(318)
高能二次电池关键物理化学问题·····	陈 军	(324)
光电化学的机遇——纳晶染料敏化太阳能电池 ·····	孟庆波, 李冬梅, 罗艳红, 于哲勋	(336)
固/液界面的形成、结构和性质·····	万立骏	(341)
分子电子器件研究中的挑战性科学问题和机遇·····	郭雪峰	(346)
“分子材料与器件”研究中的挑战性科学问题与机遇·····	于 贵, 刘云圻	(351)

第九篇 光物理与光化学

光物理及光化学研究中的挑战性问题·····	杨国强	(361)
发展稀土配合物基发光探针涉及的若干科学问题·····	王 远	(364)
超快时间分辨复杂分子动态结构的若干新趋势·····	翁羽翔	(368)
光催化过程的超快光谱研究·····	王秀丽, 姬 磊, 沈 帅, 冯兆池, 李 灿	(377)

第十篇 化学热力学

能源材料热化学研究的挑战性科学问题与机遇·····	孙立贤	(383)
化学热力学在绿色化学中的地位和作用·····	韩布兴	(388)
超额光谱——研究分子间相互作用的新思路·····	尉志武, 王楠楠	(391)

第十一篇 生物物理化学

生化反应途径的人工调控·····	庞代文, 崔 然	(399)
共轭聚合物材料在疾病相关生命体系研究中的挑战与机遇·····	王 树	(403)
DNA 纳米结构组装在研究多弱相互作用协同中的应用·····	刘冬生	(407)
核酸的手性识别·····	赵传奇, 曲晓刚	(411)
纳米粒子在高通量生物分子筛选中的应用探讨·····	赵祥伟, 顾忠泽	(415)

活性仿生体系——马达蛋白的分子组装与物理化学机理研究·····	李峻柏, 宋卫星 (420)
---------------------------------	----------------

第十二篇 能源、材料、环境等相关领域中的物理化学

生物质热解油品位提升及平台化合物高效转化利用过程的催化问题 ·····	郑小明, 侯昭胤, 楼 辉, 陈 平, 费金华 (427)
能源发展中的机遇与挑战·····	王建国, 董 梅, 李永旺, 陈建刚 (433)
新颖热电材料的设计合成、结构与热电性能关系研究·····	陈 玲, 吴新涛 (441)
环境催化研究中的挑战性科学问题和机遇·····	赵 震, 刘 坚 (444)
二次有机气溶胶 (SOA) 研究进展与展望·····	葛茂发, 刘 泽, 王炜罡, 佟胜睿 (451)

第一篇 发展展望