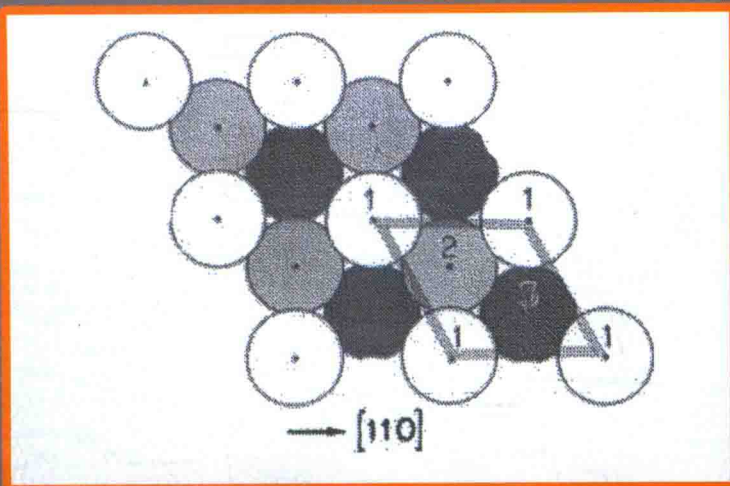




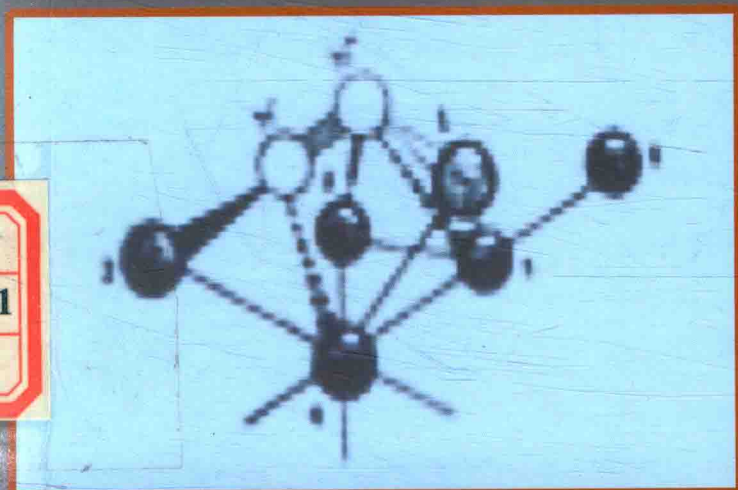
瞄准战略性新兴产业的关键发展

多相催化原理和固体催化剂的新篇章

New Aspects in Heterogeneous Catalysis and Solid Catalysts

加快中国“绿色能源”全球领先

黄开辉◎著



中国文化出版社

简介

本书瞄准新兴产业的关键发展和加快中国“绿色能源”全球领先, 阐述催化学科与表面科学、材料科学、固体物理、固态化学、理论化学和计算科学互相交叉推动下, 多相催化原理和固体催化剂日新月异的进展。主要内容为: 1. 从催化学科发展历史总结催化理论和工业实践的成功与失败; 2. 多相催化原理和固体催化剂的新世纪表征方法; 3. 总结百年氨合成催化剂研究的催化表征技术不断创新和催化学科发展的里程碑; 4. 催化科学为解决各类运载工具、交通、化学化工污染和高空对流层中臭氧层、离子层诸多 21 世纪环保难题创建新功; 5. 黄开辉提出规划光电催化氨合成常压高转化的 21 世纪设计; 6. 太阳能诱发催化剂新功能和争取我国绿色能源全球领先; 7. 非定域的分子轨道能带理论和定域的价键理论优点互补, 成为催化实践不可欠缺的新世纪“新篇章靶”, 黄开辉创立如何达到优点互补的理论: 把分子轨道能带理论采用量子力学推导变换为价键理论语言的“过渡金属成键函数和其催化应用”。本书可供有关生产、教学、科研人员阅读或(和)参考, 可供开发、审批加快建设创新型国家和加快中国“绿色能源”全球领先的有关领导阅读或(和)参考。

作 者: 黄开辉

责任编辑: 张脉峰

出版发行: 中国文化出版社

(香港九龙尖沙咀柯士甸道 122 号 12 楼 A 座)

开 本: 889 毫米×1194 毫米 1/16

印 张: 17

字 数: 290 千字

版 次: 2014 年 1 月第 1 版

印 次: 2014 年 1 月第 1 次印刷

书 号: ISBN 978-988-15691-8-9 / I · 1082

定 价: 88 元(人民币)

多相催化原理和固体催化剂的新篇章

New Aspects in Heterogeneous Catalysis and Solid Catalysts

序

著者简介：黄开辉，1955 年厦门大学物质结构专业研究生，导师为卢嘉锡教授，毕业后留校工作，曾任催化教研室主任、化学系副主任、教育部物理化学所副所长、化工科技图书编审委员会委员、中国化学化工化肥学会理事、化学物理学报编委等。进行了华东、华北和东北地区化工、石化和石油的生产基地的多相催化剂调研，总结提高后书写在“催化原理”专著中，1983 年由科学出版社出版，坚定地走产、学、研的路。

1980 年-1993 年，著者黄开辉在国际催化交流合作中，奋进、拼搏，取得业绩和成果（参见附录一）。著者在党的十八代和“十二五”规划驱动下，编写 [多相催化原理和固体催化剂的新篇章] [New Aspects in Heterogeneous Catalysis and Solid catalysts] 专著，完稿后正值学习 [中共中央关于全面深化改革若干重大问题决定] 热潮，更感到需要加快出版，与时俱进。

本书具有以下创新特点：

一. 本书所述的主要内容（见内容简要），瞄准战略性新兴产业的关键发展，争取中国“绿色能源”全球领先所需要的节能环保催化专门技术、太阳能诱发新型催化剂开发、光催化、电催化等催化关键技术和理论，这些完全符合党的十八代和“十二五”规划和十八代三中全面深化改革若干重大问题决定。

二. 本书选材标准要求，同时满足四个条件：A. 国际上已进行，B. 已有大量的信息或论文在国际刊物发表，C. 在工业上具有伟大意义或者在催化学科具有重要意义，D. 内容必须与战略性新兴产业和中国“绿色能源”等主题密切相关。

[全球科学家创造的多催化原理和固体催化剂新篇章，我们把它们归类，称为某某“新篇章靶”，意指学者选发展前沿为靶子所取得的成果]

三. 本书着重叙述“新篇章靶”中下列六大突出创新问题:

1. 1998 年常压下由分子氮加氢, 使用固体质子电催化, 高转化合成氨的实验, 其速度提升三个数量级, 引起全球关注和正在兴起的“新篇章靶”, 其中包括著者提出的 N, NH, NHX 吸附态转变为钌薄膜固体质子中“自由基型吸附态”提升速度三个数量级的理论推导; 还包括著者提出的固体质子电催化机理和著者提出的规划光电催化合成氨常压高转化 21 世纪方案 [第五章]。

2. 非定域的分子轨道能带理论和定域的价键理论优点互补, 成为催化实践不可欠缺的新世纪“新篇章靶”, 著者提出如何达到优点互补的理论: 把分子轨道能带理论采用量子力学推导变换为价键理论语言的“过渡金属成键函数和其催化应用”, 取得五个主要成果 [第七章和第八章], 其中过渡金属上 N, NH, NHX 吸附态转变为钌薄膜固体质子中“自由基型吸附态”过渡成键函数计算, 显示在钌薄膜上合成氨速度为什么能提升三个数量级和如何选择新类型合金工业催化剂; “吸附质-诱发”的空 M.O.s 新概念, $\text{CO}_2\pi\text{-Md}\pi$ 和 $\text{CO}_5\sigma\text{-Md}\sigma$ 在 V_s 和 V_d 带上具有的相对的杂化能力对比, 和“d 反馈送”新概念等成果最为突出。

3. 1980 年后多相催化联合光催化作用和电催化作用开发太阳能, 太阳能诱发催化剂新功能的“新篇章靶”正在兴起。著者阐述其内容和重要性后, 建议光电合成应用于废气变宝, 改变原材料, 燃料合成路线和合成生命科学材料等等宏伟目标 [第六章]

4. 催化作用和催化剂的定义, 历经百年之争, 现已有 21 世纪的定义, 但我国仍然使用古典的定义 [包括催化权威使用], 有必要阐明 [第一章、第三章和第八章]

5. 氨合成工业铁催化剂上反应机理经百年研究和争论, 2007 年 Ertl 为此得 Nobel 化学奖, 是多相催化中最具先进性和示范性的“新篇章靶”, 著者参与并提出七种创新篇章 [第二章和第三章], 其中著者 2013 年提出: 应用生成的 N, NH, NHX 吸附态, 连续不断的转变为钌薄膜固体质子“自由基型吸附态”方式于工业铁催化剂上的全程机理, 是最新突破。

6. 历经 84 年之争, 工业和基础研究方面广泛使用的 Temkin 方程式 (1929 年和 1963 年推广式) 的“新篇章靶” (Nobel 奖化学得主 Ertl 也参与争论), 著者对 Temkin 方程提出六个真凭实据存在问题 [第三章和第五章]

四. 本书著者为祖国不畏艰险,勇于攀登科学研究高峰,为人类幸福参与“新篇章靶”学术争论,提出16种创新篇章见解。但因涉及面过广,学识浅薄,错误在所难免,欢迎批评指正。

五. 完稿后正值贯彻[中共中央关于全面深化改革若干重大问题决定],欢迎人民献言献策,例如,对于我们这个主题而言,到底中国科学家怎样才能更有效地与国际科学家一起参与本书所谓的“新篇章靶”?他们或她们怎样征服千难万难达到热爱祖国,造福人类?著者感到根据客观存在的真凭实据,照片和文件,说明著者亲身经历的“五心”经验,这经验着重叙述:只要相信党中央国务院的政策和执行我国法治,贯彻全面深化改革决定,克服前进障碍,就可达到热爱祖国,造福人类的目标,对我国科技学术的提高和繁荣有现实意义,同时,著者年逾八旬,叙述的“五心”经验,如何为了人民,又合理合法保护了自己,对于我国年青科学家或后继人可能有鼓励的催化作用。贯彻全面深化改革决定中,需要热爱祖国,为了人民,奋战一生的“五字”经验精神,而且更有利于社会和谐。居于上述目标,著者编写第九章。

六. 著者衷心感谢国内外人士在学术交流中对我们的支持和帮助,致谢见书末答谢栏。

黄开辉 2013 年 10 月 11 日

本书答谢栏

● 衷心感谢下列的全球催化学科著名的国际催化大师们，对著者的科研资助合作邀请，有益的建议和评论

The author wishes to thank Profs. M. Boudart, K. Tamaru, B. Delmon, R. L. Burwell, Jr., A. T. Bell, A. Ozaki for their invitations, helpful suggestions and comments.

* 向国内人士致谢

1. 衷心感谢厦大卢善庆教授对稿件审查和修改，厦大刘光老干同志和邱贞花老同事对本书出版的支持和帮助。

2. 衷心感谢厦门大学 1980 年主要领导，执行改革开放政策，对我们开始走出国门进行国际学术交流给予指导和支持，从而能在第七届国际催化会议上首破我国催化论文被评选为大会上报告的记录。

3. 衷心感谢曾为我们的科研和催化剂工作中作了贡献的韩宝华，邹作民，张平，杨叔荣等同志。

黄开辉 2013 年 10 月 11 日

衷心感谢厦大卢善庆教授审阅后，提李白<行路难>三首之一，写道：

长风破浪会有时，

直挂云帆济沧海。

附录 《百年中国》 介绍著名化学催化专家黄开辉

《百年中国》扉页介绍 33 著名专家，黄开辉为第八位



黄开辉，1932 年 11 月生，福建永定人，厦门大学物质结构专业研究生，导师为卢嘉锡教授，毕业后留校工作，曾任催化教研室主任、化学系副主任、教育部物理化学所副所长、化工科技图书编审委员会委员、中国化学化工化肥学会理事、化学物理学报编委等。进行了华东、华北和东北地区化工、石化和石油的生产基地的多相催化剂调研，总结提高后书写专著，由科学出版社出版，坚定地走产、学、研的路。

黄开辉教授改革开放，走出国门，在国际科研合作交流中，奋进拼搏，独特创新，取得“破”、“超”、“升”骄人业绩和丰硕的成果，为回报祖国和人民，历尽艰辛和曲折投诉返国。

黄开辉教授致力于：【研究节能环保、新一代新能源、新能源汽车等领域的前沿关键技术，用先进技术支撑战略性新兴产业发展。实现从“中国制造”向“中国创造”的转变，...】，取得【催化作用理论和催化剂实践】三项成果和“貳项 2020 年中国未来设计”，说明有宽阔科学技术基础，源远流长，魅力隽永。

第一， 创立了【三理论和壹方程】：助剂诱发的质子捕捉分子氮到铁晶面理论、分子氮在（111）晶面六铁活性中心吸附离解模型理论、新反应离解模型新位能图理论和按黄开辉模型推导的氨合成催化反应动力学方程，发展了 G. Ertl（2007 年诺奖得主）和 M.Boudart 氨合成工业双促进铁催化剂催化反应机理”，黄开辉教授单人署名的论文被第七届国际催化会议评选为中国代表团唯一在会上口头报告论文，全文刊登在会刊上（A38，P554-565，在铁催化剂上的活性中心模型，反应动力学机理），首破中国论文如此被评选上的记录。

1.黄开辉使用现场 In Situ 数据^[6]，由助剂诱发的质子，提高分子氮的粘着系数，分子氮才有机会解离，黄开辉提出：“助剂诱发的质子捕捉分子氮到铁表面，还进行偶极捕捉推动力的计算”的理论[注：分子氮的粘着系数比分子氢的粘着系数少千万倍，分子氮究竟怎样能粘上铁表面后解离，是 G. Ertl 和 M.Boudart 所提机理必须回答的问题]；

2.黄开辉所提出活性中心的六铁模型^[5]，为 G. Ertl 指定解离的 N 或 NH，就在六铁模型 A-set ,B-set 上^[5]，还使用 N-N-N 同位素交换实验事实证明，该模型说明了（111）面活性为什么比其他晶面大好几倍；

3.黄开辉由六铁模型解离的 N 或 NH 的吸附键强比 Fe₄N 键强弱许多，加氢也容易，黄画出比 G. Ertl 更合理的反应历程位能图；

4. 在吸收国际上各种著名催化反应动力学方程的精华后，使用黄开辉微观模型，推导了工业铁催化剂上黄开辉氨合成催化反应动力学方程^[7-8]，该方程的推导所根据的活性中心模型假设，反应单元步骤假设，由统计热力学计算各种吸附物（特别是氢质子型吸附），动力学方程模拟和方程推导的数学细节，全与 1963 年 Temkin 推广式不同并由南化院使用序贯法推广于工业大型反应器设计。

证明黄开辉【三理论和壹方程】的资料：

A. 1980 年黄开辉教授单人署名的论文被第七届国际催化会议评选为中国代表团唯一在会上口头报告论文，全文刊登在会刊上（A38，P554-565，在铁催化剂上的活性中心模型，反应动力学机理），首破中国论文如此被评选上的记录。



上页左为黄在国际催化大会报告题目、讲台和黄所创立的六铁模型；

上页右为黄夫妇与第七届国际催化会议主席 A. Ozaki 合影。

B. 第七届国际催化会议主席 A. Ozaki 提供 N-N-N 同位素交换实验事实，还赠送 Ozaki 写的同位素专书给黄开辉教授。

C. 南化院设计院院长吴锡军等，化工学报，1979 第 2 期，P133-14 使用序贯法证明黄反应动力学方程式可推广于工业大型反应器设计

第二，创立了国际尚未见发表，由黄开辉命名的【过渡金属成键函数及其在催化吸附和催化反应的应用】新理论，或称【过渡金属能带结构化学键化理论】，进行表面科学《物理的不定域化模型》与表面化学《定域化成键模型》的创新结合，达到 Pauling《五十年代诺贝尔化学奖得主》金属能带理论电子结构化学键化的大跃升，比表面半无限伸长的模型和区域原子簇模型，如 LDF, GVB, EMT... 等，更能定量说明倒转 UPS, FEED 光谱，SPIES, XPS, EELS 等光谱，以及吸附剂反馈共振谱的催化作用，该新理论方法具有迅速和化学直观地给出催化相对性能或相对数据（键能，键结构，吸附态振动频率，金属-载体或金属-助催化剂间互相作用），可应用于化工和石化工业中烃类加氢，脱氢，F-T 合成，甲醇合成中，尤其是 C-H, H-H, C-C, C=O, C=C, N=N, N=O... 等的 s 键，p 键，或 sp 键的活化，和催化剂组成的选择，得到国际催化大师和欧共体与中国科研合作负责人的高度好评。结合新世纪多相催化进展，新理论方法可应用于汽车工业、环保污染、光电半导体催化、绿色能源和太阳能利用等，为中国绿色能源在 2020 年全球领先打下基础。

证明黄开辉第二项成果的的资料：

A. 在国际著名刊物上发表了论文十篇，其中黄开辉理论模型阐述，参见论文八篇目录中的第 1 至第 4 篇，必须经多名国际同行专家审查，而且认为比当代

理论模型有特别的优点才能通过，而且在国际催化理论期刊中同一期同时刊登，表明对此理论的重视，证明该论文的质量水平。论文八篇目录如下：

1. 黄开辉，【过渡金属成键函数及其在催化吸附和催化反应的应用，第 I 篇：理论模型】，分子催化杂志，64，53-84 (1991)。K.H.Huang, 【Transition Metal Bonding Functions and Their Application in Adsorptions and Catalytic Reactions, Part I: Theoretical Model】 J. Mol. Catal., 64，53-84 (1991) .

2. 黄开辉，【过渡金属成键函数及其在催化吸附和催化反应的应用，第 II 篇：CO 化学吸附微观机理和 $\sigma\pi$ 络合新概念】，分子催化杂志，64，85-101 (1991)。K.H.Huang, 【Transition Metal Bonding Functions and Their Application in Adsorptions and Catalytic Reactions, Part II: Micromechanism of CO Chemisorption and a New Concept of $\sigma\pi$ Coordination】 , J. Mol. Catal., 64，p85-101 (1991) .

3. 黄开辉，【过渡金属成键函数及其在催化吸附和催化反应的应用，第 III 篇：CO $\sigma\pi$ 络合在过渡金属上的成键函数，所呈现的能带金属价带结构和周期效应】，分子催化杂志，64，103-117 (1991) K.H.Huang, 【Transition Metal Bonding Functions and Their Application in Adsorptions and Catalytic Reactions, Part III: Effect of Metal Valence Band and Periodic Trend of CO $\sigma\pi$ Bonding Functions on Transition Metals】 ,J. Mol. Catal., 64，103-117 (1991) .

4. 黄开辉，【过渡金属成键函数及其在催化吸附和催化反应的应用，第 IV 篇：成键函数用于 CO 吸附的成键、IR 光谱、表面吸附品种的分配与吸附热的表征】，分子催化杂志，64，119-132 (1991)。K.H.Huang, 【Transition Metal Bonding Functions and Their Application in Adsorptions and Catalytic Reactions, Part IV: Characterization of CO Adsorption—Bonding, IR Spectra, Surface Species Population and Adsorption Heats】 , J. Mol. Catal., 64，119-132 (1991) .

5. 黄开辉，曾晓鸣，李基涛【从 TPD 现场 In Situ 测试数据验证作者所提出氨合成铁催化剂上的新观点，I。氢在铁催化剂上的 TPD 谱图和铁催化剂上的钾促进剂生成的表面的活性吸附品种】，催化杂志，81，259-272 (1983) . 该文由黄开辉于 1981 年 8 月 27 日在美国 182 届化学会全国会议上宣读。宣读后，接受 M.B.Boudart 教授邀请交流。K.H.Huang, X.M.Zeng, J.T.Li, 【Data from Temperature-Programmed-Desorption to Check New Aspect of Ammonia Synthesis on Iron Catalysts, I. The TPD Adsorbed Hydrogen on Iron Catalysts and Active

States】，J.Catal., **81**, 259-272 (1983). The paper was presented at 182nd ACS National Meeting, August 27, 1981.

6. 黄开辉, 【用过渡金属成键函数表征在 Fe, Pd, Pt 附戴型催化剂上, 其非还原离子的催化作用性能】, 应用催化杂志, **15**, 175-184 (1985). K.H.Huang, 【The Bonding Functions Characterizing the Effects of Non-Reducible Cations upon Properties over Fe, Pd, Pt Supported Catalysts】, Applied Catalysis, **15**, 175-184 (1985).

7. 黄开辉, 沈雁飞等 【在 Pd/Silica 催化剂上, 氯化络合物在 Pd 表面的结构和分散度对 CO 加氢的催化效应】, 今日催化杂志, **6** 47-54 (1989). K.H.Huang, Y.F.Shen, L.F.Cai, J.T.Li, S.J.Wang 【The Effects of Chloride Complexes on Pd Surface Structure, Dispersion and CO Hydrogenation over Pd/Silica Catalysts】, Catalysis Today, **6** 47-54 (1989).

8. 黄开辉, 沈雁飞等 【在 CO 加氢 Pd-Mg (II) / Silica 催化剂上, 碱土氯化物前驱体对钯价态的影响】, 应用催化杂志, **57**, 55-70 (1990). K.H.Huang, Y.F.Shen, L.F.Cai, J.T.Li, S.J.Wang, 【Effects of Chloride Precursors on the Palladium Valency of Pd-Mg(II)/silica Catalysts for CO Hydrogenation, Applied Catal., **57**, 55-70 (1990).

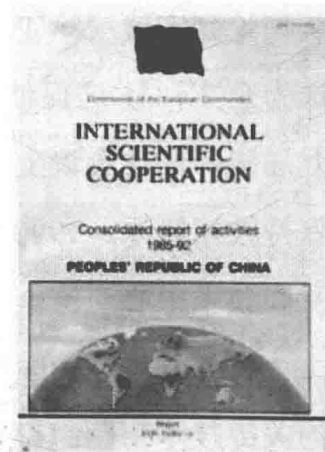
B. 得到催化元老 M. Boudart 主席来信说: “收到您的最新出版论文表示感谢。表明您对金属电子结构的处理是个很大进展, 如与 Pauling 所创建的金属键理论比较起来, 更感到是如此” (附该信的复印件)。

C. 黄开辉教授签署的 1989-1990 欧共体资助国际科学合作合同完成情况, 公报刊在欧共体—EUR1536EN, 这是欧共体—EUR1536EN 封面的复印件。

黄开辉教授签署的 1989-1990 欧共体资助国际科学合作合同 EUR1536EN 刊在合同 P107-110。

D. 黄开辉 【过渡金属成键函数及其在催化吸附和催化反应的应用】, 得到欧共体科研合作处负责人 Director Dr. G. Valentini 的贺信, 信中说: “我很高兴您来欧洲访问, 尤其是您到鲁温大学已取得非常成功”“我非常感谢您精致和勤奋地完成欧共体合同中科研活动和任务”。

第三, 【环氧乙烷高选择性银催化剂的开发...从理论到实践】, 选择性超过引进的联碳公司 UCC-H1280 催化剂 4 个单元, 理论论文在国际催化会议上全文



刊登.促使 UCC 公司出资邀请讲学,欧共同体出资到 ICC 公司交流。

A. 黄开辉为催化剂选择性提高准备之一: 应第八届国际催化会议主席 R. J. Burwell 邀请(对方资助),引进现代催化测试技术,右边下角为黄开辉教授与第八届国际催化会议主席 R. J. Burwell 夫妇合影。

B. 黄开辉为催化剂选择性提高准备之二: 1983 年黄开辉教授应加州 Berkely 分校催化基地 A.T.Bell 主任的邀请(对方资助),引进现代催化测试技术,下面为 A.T.Bell 主任与黄开辉教授合影(在其现代催化测试室)。



C. 黄开辉教授在上述国际著名基地,为回国后国内环氧乙烷催化剂选择性提高大会战打下基础,促进 1987 他研制的环氧乙烷催化剂评比中被评为选择性第一(中石化总公司主持下,21 天的微反全国大评比),比引进 UCC-H1280 催化剂选择性超过 4 个单位。

D. 黄开辉教授使用表面科学现场 In Situ 测试,剖析选择性提高理论论文, The Development of High Selectivity Silver Catalyst for Ethyleneoxide—From Theory to Practice, (VOL.IV, P1680-1687), 环氧乙烷高选择性银催化剂的开发...从理论到实践《第 IV 卷,页码 1680-1687》,被 1988 年第九届国际催化会议评选为全文刊登.这促使世界著名四大化学工业公司中联碳公司 UCC 马上派人到第九届国际催化会议上,联系出资邀请黄到其技术中心讲学,其主任还来信,要求保持技术联系。1990 年英国帝国化学公司 ICC 也邀请黄教授到其环氧乙烷分厂及和技术中心交流,由欧共同体出资。

黄开辉教授热爱祖国、热爱人民,致力于从“中国制造”向“中国创造”的转变的关键技术...【催化作用理论和催化剂实践】,他的成功是贯彻胡锦涛总书记【科学发展观】的结果,他在科技上艰辛奋战,是实现温总理“有理想,善学习,讲道德,要自立和勇奋斗”的指引。时年 80 岁高龄的厦门大学黄开辉教授,是中国化学研究领域的奇葩,时光飞逝,然而,在中国化学科学这块沃土上,不能忘怀的,是黄教授的一份辛勤浇灌后的催化科技成果和务真求实传为美谈的精神。

[《百年中国》编纂]

目 录

第一章 “多相催化作用和固体催化剂的新篇章” 导论	1
1.1 催化学科与表面科学、材料科学、固体物理、固态化学、理论化学新技术交叉推动下，多相催化作用和固体催化剂的涵义和范围	1
1.2 多相催化作用和固体催化剂的现代发展	1
1.2.1 增进人类幸福之源	1
1.2.2 开发太阳能，解决能源危机	2
1.2.3 多相催化量大面宽的神威	2
1.2.4 多相催化可开发的空間、效率和价值，节节上升	2
1.3 坚决执行党中央、国务院的指示和学习国际催化发展的现代经验	3
1.3.1 坚决执行党的十八代和“十二五”规划，为《未来中国的走向》奋斗	3
1.3.2 撰写“多相催化作用和固体催化剂的新篇章”的选材条件	3
1.3.3 学习国际催化发展的现代经验	4
1.4 多相催化作用和固体催化剂各种理论或概念形成的历史总结	5
1.4.1 1902 年 Sabatier 的催化作用理论	5
1.4.2 Langmuir 理想活性中心（棋盘格型）理论	5
1.4.3 Taylor 活性中心理论	6
1.4.4 气体动力学和过渡状态理论	6
1.4.5 巴兰金多位理论(1929)	11
1.5 各种复合物配位络合理论和概念	11
1.5.1 复合络合理论（A）：复合物（complex compound）配位络合理论	11
1.5.2 复合络合理论（B）：Pauling 配位络合价键杂化轨道理论	14
1.5.3 复合络合理论（C）：Pauling 非成键孤对电子占有立体空间理论 ...	16
1.5.4 复合络合理论（D）：Jahn-Teller 效应和晶体场理论	18
1.5.5 复合络合理论（E）：晶体场理论、配位场理论和分子轨道理论联合	

应用	22
1.6 国际对 Pauling 过渡金属能带理论的评价	23
1.6.1 Beek ^[28] 对 Pauling 过渡金属能带理论的评价	23
1.6.2 Boudart ^[31] 对 Pauling 过渡金属能带理论的评价	24
1.6.3 M.Boudart 对 1990 年黄开辉提出过渡金属函数成键理论的评价	24
第二章 固体催化剂的现代表征	29
2.1 “固体催化剂的现代表征”导言	29
2.1.1 固体催化剂的现代表征技术的英文缩写和英文名称列表	30
2.1.2 实用催化剂的表征总图解和相应的表征技术方法	32
2.1.3 用光子, 电子和离子关联发生原理, 列出催化剂各种表征方法	33
2.2 固体催化剂物理的性能的表征	33
2.2.1 比表面和孔度	33
2.2.2 颗粒大小和分散度	33
2.3 工业实用固体催化剂现代表征方法之一: X 光衍射, 散射和 EXAFS 技术	34
2.3.2 同步回旋辐射 In Situ 测试, 和 EXAFS 技术	34
2.4 工业实用固体催化剂现代表征方法之二: 电子显微镜类	34
2.4.1 传统的透射电子显微镜 (CTEM)	35
2.4.2 高分辨率电子显微镜 (HREM)	35
2.4.3 扫描透射电子显微镜 (STEM)	35
2.4.4 扫描电子显微镜 (SEM)	35
2.4.5 选择区的电子衍射 (SAED=Selected Area Electron Diffraction)	36
2.4.6 分析电子显微镜 (AEM)	36
2.4.7 控制常压电子显微镜 (CAEM)	36
2.5 工业实用固体催化剂现代表征方法之三: 红外和雷曼光谱等 ^[12-15]	36
2.5.1 红外透射吸收光谱 (ITAS)	37
2.5.2 激光雷曼光谱 (LRS)	37
2.6 工业实用固体催化剂现代表征方法之四: 穆斯鲍尔谱和 γ 光谱技术	37
2.6.1 穆斯鲍尔谱	38

2.6.2 固态核磁共振 (NMR)	38
2.7 工业实用固体催化剂现代表征方法之五: 电子光谱和离子光谱	39
2.7.1 X 光光电子光谱 (XPS)	39
2.7.2 二次离子质谱 (SIMS) 和二次中性质谱 (SNMS)	40
2.7.3 低能离子散射 (LEIS) 和路德福背散射 (RBS)	40
2.8 工业实用固体催化剂五种现代表征方法特点对比	41
2.9 工业实用固体催化剂其它传统和现代表征方法	41
2.9.1 光谱分析方法 (OS) 和电子自旋顺磁共振 (EPR)	42
2.9.2 原子发射光谱法 (AES)	43
2.9.3 原子吸收光谱法 (AAS)	43
2.9.4 原子荧光光谱法 (AFS), 分子荧光光谱法 (MFS) 和分子磷光光谱法 (MPS)	43
2.9.5 可见分光光度法 (UV-VIS)	43
2.11 固体催化剂的现代表征是多相催化作用理论创新的前题	43
第三章 百年氨合成工业双促进铁催化剂开创了多相催化表征技术、多相催化作用机理和多相反应动力学的新世纪里程碑	48
3.1 本章重点介绍“氨合成铁催化剂的实践和理论, 促进催化学科新世纪里程碑”	48
3.2 国际催化大师和权威 Emmett, Ozaki, Tamaru, Houriuti 等提出的氨合成催化反应机理	48
3.3 G.Ertl (2007 年 NOBEL 化学奖得主) 等在铁单晶面上提出的氨合成催化反应解离机理 (简称解离机理)	49
3.4 Boudart 学派开创的多相催化作用研究工作	53
3.4.1 Boudart 学派研究工作之一: 铁原子簇的表面 C_7 位	54
3.4.2 Boudart 学派研究工作之二: 铁颗粒大小伴随的 $N_2/3H_2$ 表面结构重整	54
3.4.3 Boudart 学派研究工作之三: 评述 “活性中心”概念和应用“分子型活性中心”概念	54
3.5 本书著者黄开辉提出与国际上不同的氨合成催化理论和动力学方程六	

方面创新篇章	57
3.5.1 本书著者黄开辉提出氨合成催化理论和动力学方程创新篇章之一: “ $H^{\delta+}$ 形成原因和所起的诸种关键作用”	58
3.5.2 本书著者黄开辉提出氨合成催化理论和动力学方程创新篇章之二: “双促进铁催化剂上氨合成活性中心结构和反应机理”	59
3.5.3 本书著者黄开辉提出氨合成催化理论和动力学方程创新篇章之三: “评述 Ertl, Boudart 发表的资料, 从中提出其结论正确和错误所在, 再创新篇章”	63
3.5.4 本书著者黄开辉提出氨合成催化理论和动力学方程创新篇章之四: 根据“Emmett, Ozaki, Tamaru, Houritu 资料, 提出可使用其资料 解释或证明黄提出的铁表面同位素交换创新机理”	65
3.5.5 本书著者黄开辉提出氨合成催化理论和动力学方程创新篇章之五: “使用八种“理论”方法, 证实黄开辉所提出学术观点的根基”	66
3.5.6 本书著者评述全球驰名的 Темкин 动力学方程在推导假设上存在的 六方面重大问题 (创新篇章之六)	69
3.6 正确对待古典的 (传统的) 形式动力学方程式的功过	75
3.6.1 古典的形式动力学方程式应用常发生之“过” (缺点)	75
3.6.2 古典的形式动力学方程式某些实际应用之“功” (优点)	75
3.6.3 总结“百年氨合成催化动力学方程式的进展是多相催化动力学方程 式不断开拓的里程碑”的必要	76
第四章 催化学科为解决各类运载工具、交通、化学化工污染和高空对流层中 臭氧层、离子层诸多 21 世纪环保难题创建新功	78
4.1 本章引言	78
4.2 化石燃料燃烧中碳排放污染和高温燃烧氮排放污染的生成分析浅说 ...	78
4.2.1 排放气体和污染物的分析方法简介	79
4.2.2 排放气和污染物的生成原理初步分析之一	79
4.2.3 排放气和污染物的生成原理初步分析之二	79
4.2.4 从本节图 1 ^[10] 可使读者获得排放汽中污染物百分含量的印象	80
4.2.5 从 4.2.5 图 1 使读者获得道路交通引起排放汽中何种污染物较高的	

印象.....	80
4.2.6 催化剂能使排放气体成份的臭氧增值因子（污染指标之一）减少	81
4.3 排放气体成分间的多种反应（排放物间的初始反应和排放物间的二次反 应）	82
4.3.1 内燃机排放物间的初始反应(排放物与氧气氧化的三种反应，排放 物与 NO 氧化/还原的三种反应，水煤气反应和水蒸汽重整反应， 共八种初始反应)	82
4.3.2 排放物间的二次反应（与 SO ₂ 的二种反应和与 NO 的三种反应式）	83
4.4 内燃机排放物与催化剂表面接触的五种传送方式和其作用效率	83
4.4.1 内燃机排放物与催化剂表面接触的五种传送方式.....	83
4.4.2 发动机形成的排放气体的成份与引擎参数（A/F）间的函数关系 ...	85
4.4.3 发动机形成的排放气体成份与 λ （浪达值 lambda value）参数间的 函数关系	86
4.5 控制排放气体组成的催化剂设计	89
4.5.1 控制排放气体组成的催化剂设计概说.....	89
4.5.2 珠子小球催化剂.....	89
4.5.3 独石催化剂.....	91
4.6 三路催化剂（Three-way Catalyst）(TWC).....	103
4.6.1 概说---三路催化剂性能的影响因素.....	103
4.6.2 三路催化剂性能测量.....	104
4.7 关于柴油燃料发动机设计类型，柴油发动机产生的喷射物的化学成份特 点和柴油发动机喷射物中使用催化剂环保去污的必要性和重要性	107
4.7.1 关于柴油燃料发动机设计类型.....	107
4.7.2 引起柴油燃料发动机设计的多种多样类型的来源分析.....	108
4.7.3 柴油发动机产生的喷射物的化学成份特点和所含致癌物.....	109
4.8 环境催化作用中 NO _x 的 SCR，VOC 的除去，NO 的分解和氢（氯）氟 烃（CFC）的催化合成与催化除去.....	114