

固体表面物理化学
国家重点实验室

STATE KEY LABORATORY
FOR PHYSICAL CHEMISTRY OF THE SOLID SURFACE

1989—1990

研究论文年报

ANNUAL RESEARCH REPORT

廈門大學

XIAMEN UNIVERSITY, CHINA

厦门大学固体表面物理化学国家
重点实验室互作年报
(一九八九 —— 一九九〇年)

目 录

一、前言.....	(1)
二、厦门大学固体表面物理化学国家重点实验室简介.....	(3)
(1). 概况	
(2). 取得的成果及水平	
(3). 研究方向和主要研究内容	
(4). 学术委员会	
(5). 主要仪器设备	
(6). 队伍建设与人才培养	
(7). 国内外合作与对外开放	
三、建立固体表面物理化学国家重点实验室的专家论证意见....	(9)
四、专家验收委员会验收意见.....	(13)
五、实验室课题基金申请指南.....	(16)
六、1990年开放课题一览表.....	(18)
七、1989-1990年发表的研究论文	
(1). 论文目录.....	(24)
(2). 论文部分人名索引.....	(40)
(3). 论文内容.....	(A1)

前 言

固体表面及其与气液间形成的固/气和固/液界面是当今表面化学、表面物理的主要研究对象,与生命科学中有关界面问题的研究也有密切关系。对上述表面和界面发生的物理化学过程的研究,涉及到催化化学、电化学、结构和量子化学等多门学科领域,是化学工业、炼油工业、能源、材料和环保等与经济发展和社会进步密切相关的重大问题的科学基础。

厦门大学的物理化学研究始于五十年代,经过30多年来的发展,逐渐培养出一支年龄结构比较合理的优秀科研队伍,形成了研究特色,取得了一批高水平的研究成果,成为我国在固体表面物理化学研究方面的重要基地。在此基础上,国家计委会同国家教委于1986年组织专家进行论证,并于翌年批准在厦门大学建设固体表面物理化学国家重点实验室。本着边建设、边开放的原则,实验室于1990年2月建成并通过验收。

几年来,实验室在科学研究、对外开放、引进和培养人才等方面有了长足进展。所承担的国家攀登计划和国家基金委重大、重点等项目或其子课题,如CO氢和低碳烷烃临氧催化转化及有关催化剂体系的设计、研制,光谱电化学和约束腐蚀层纳米加工技术的构思、设计、控制和检测,量子化学的群论新方法和价键理论的酉群方法等研究取得重要进展;研究固体表面和固/液、固/气界面的实验技术(如STM和ESM等显微技术,原位红外和原位拉曼光谱技术,时间分辨FTIR及有关联用技术),和理论方法(如研究金属单晶表面和化学吸附的“金属态原子”模型,研究氧化物单晶表面和化学吸附并经Madelung势修正的晶体场嵌入簇模型,量子化学与分子力学结合的计算方法和采用键级守恒-Morse)势模型的能学计算方法等)都得到发展和应用。上述研究成果不但反映了有关学科领域由体相到表面、由宏观到微观和由静态到动态的飞跃,尤其是向高的空间分辨率(原子分辨率)和时间分辨率发展的动向,而且也体现了三个分支学科方向的相互交叉、渗透和有机结合。

从年报可以看出，在老一辈科学家的带领下，几位年轻学者正在迅速成长为新一代的学术带头人。本室先后吸引了 5 名从美、英、法、日等国取得博士学位后来室工作的博士后人员，3 名已晋升为教授（研究员），1 名晋升为副教授，其中 1 位教授已批准为博士生导师。可喜的是，这些年轻学者均在 40 岁以下，一批中年学者也起到了很好的承上启下的作用。

本室今后将注意借鉴国内、外国家（重点）实验室的经验，进一步做好自身建设和对外开放工作，决心把实验室办得更好，上一个新台阶。

为及时总结成绩和对外交流，本室今后每年将编纂、出版年报。

厦门大学固体表面物理化学 国家重点实验室简介

一、概 况

厦门大学固体表面物理化学国家重点实验室于1987年开始建设,1990年2月建成并通过验收,正式对国内外开放。中国科学院学部委员田昭武教授任实验室主任,中国科学院学部委员张乾二教授任实验室副主任,中国科学院学部委员蔡启瑞教授任学术委员会主任,中国科学院学部委员唐有祺教授任学术委员会副主任。

固体表面物理化学是当前世界科学发展中最活跃的前沿之一。其主要任务在于研究固体表面上化学反应的速度、机理和控制因素。固体表面因为价不饱和性以及微观结构、微环境等的差异而具有化学活性和选择性,而且表面反应可在电场或光等外界扰动的作用下进行,从而为化学反应的控制增加了有利条件。以化学吸附、多相催化、界面电现象等为主要内容的固体表面物理化学是化学工业、炼油工业、能源、材料、环境保护等国民经济组成部分的重要科学基础。加强这一领域的研究对我国国民经济的发展,对相关重大科技问题的解决将发生深远影响。

厦门大学物理化学专业建立于五十年代。经过近四十年的努力,在固体表面物理化学研究方面打下坚实的基础。形成了一支经验丰富,专业结构和年龄层次合理的研究队伍,研究工作已形成了特色。在络合催化理论、重要催化反应机理研究、高效催化剂研制、电极过程动力学与研究方法、电化学过程的谱学表征、金属电沉积、化学电源、多面体分子轨道理论和量子化学中的群论新方法等方面的研究,取得了一批达到国内先进水平,在国际上有一定影响的科研成果。自1987年实验室建设以来,先后获国家自然科学奖二等奖1项、三等奖2项、国家发明奖三等奖1项、国家教委科技进步奖6项、省级各种奖5项,获国家专利12项,承担各类科研课题102项成为我国固体表面物理化学的重要研究基地之一。

二、研究方向和主要研究内容

研究方向

实验室以固体催化剂和固体电极以及功能膜材料的表面和界面化学为主要研究对象,研究表面组成和结构,吸附和化学反应,反应的动力学和机理,固体表面能谱及其解析和吸附化学键;发展多相催化理论,电极过程理论,表面及吸附态结构与性能的特征实验技术和理论研究方法,解决与化工、能源、材料和环保等关系极为密切的重大科学技术问题。

主要研究内容

(1) 多相催化与均相配位催化(包括金属簇合物催化和金属酶催化)在小分子及简单有机物的络合活化,高位能中间态的部分稳定化和催化机理等方面的关联研究。

(2) 甲烷和其它碳烷烃在固体催化剂上的临氧活化和选择转化。

(3) 合成气($\text{CO}+\text{H}_2$)和CO催化转化的表面物理化学,催化剂表面 C_1 、 C_2 、 C_3 等物种的结构、吸附键本质、性能和催化反应机理。

(4) 催化作用的理论模拟,催化剂和催化反应的原位、瞬态表征,计算机辅助的催化剂设计专家系统。

(5) 具有催化及分离功能的膜材料,新型分子筛超细微粒,以及原子簇催化剂等新催化剂或新载体材料的研究。

(6) 电化学界面结构及表征技术:涉及化学细节和空间分辨接近原子尺寸的界面结构研究,表征固/液电化学界面和反应过程的现场谱学方法和显微技术及其研究。

(7) 电极表面过程研究:电化学吸附和电极表面化学修饰,结构敏感的电催化反应、电极反应动态学研究,单晶电极表面的分子过程和反应动力学。

(8) 光电化学研究:电子导体/离子导体界面上的光效应,光电化学合成,微电子装置制作中的光电化学问题。

(9) 能源、材料、环境及信息科学中的电化学问题:扩展界面区的研究,电化学新体系的研究,功能材料的电化学制备方法,电化学过程中新相形成及

相的消长研究等等。

(10) 生物和医学科学中的电化学问题: 膜的电化学, 分子生物学中的电化学方法, 生物电催化等等。

(11) 过渡金属、合金或氧化物固体表面上小分子的化学吸附及化学反应的量子化学计算方法的研究及其应用。

(12) 以激光等非常规手段产生原子与分子簇, 研究它们的结构, 性质与反应动力学。

三、主要仪器设备

实验室建设以来, 国家先后拨款480万元, 购置了总价值约100万美元具80年代国际先进水平的仪器。实验室现拥有仪器设备81台(件), 其中十万元以上大型仪器11台(套)。经过本室全体人员的努力, 目前主要仪器均装有自行研制的加温加压样品池或电解池, 可用于固/气或固/液界面的现场暂态过程的研究。实验室还自行设计研制了一批有特色的仪器, 可提供开放。此外, 厦门大学分析测试中心拥有一批进口精密仪器设备, 与本室联合开放。

主要仪器设备

- * 单道/多道拉曼光谱仪 RAMANOR U-1000 和 S-3000
- * 傅里叶变换红外光谱仪 Nicolet 730 和 740sx
- * 带漫反射附件的紫外可见吸收光谱仪 CARRY 2215
和 Shimadzu UV-2100
- * 表面积及孔径分布测定仪 SORP 1900
- * 转靶X射线衍射仪 D/MAX-RC
- * 四园X射线衍射仪 CAD4 SDP44
- * 光学多道分析仪 OMA III 1460
- * 电化学综合测试系统
- * 超小型计算机 VAXII
- * 顺磁共振波谱仪 ER-200D
- * 核磁共振波谱仪 FT-80A

提供开放的自制仪器

- * 脉冲激光飞行时间质谱仪
- * 电极表面微区电位电流密度分布测量仪
- * 激光扫描微区光电流谱仪
- * UV/V反射光谱-光电流谱联用谱仪

厦门大学分析测试中心联合开放仪器

- * 光电子能谱仪 ESCLAB MKII
- * 透射电子显微镜 JEM-100CX
- * 扫描电子显微镜 S-520

四、学术委员会

实验室主任

主 任: 田昭武

副主任: 张乾二 万惠霖

学术委员会组成

顾 问: 卢嘉锡 学部委员 中科院主席团主席

唐敖庆 学部委员 吉林大学教授

主 任: 蔡启瑞 学部委员 厦门大学教授

副主任: 唐有祺 学部委员 北京大学教授

委 员 (按姓氏笔划排列):

万惠霖 厦门大学教授

邓景发 复旦大学教授

田昭武 学部委员 厦门大学教授

闵恩泽 学部委员 中国石油化工总公司高五

陈 懿 南京大学 教授

吴征铠 学部委员 核工业总公司教授

吴浩青 学部委员 复旦大学教授
吴 越 中科院长春应化所研究员
吴钦义 厦门大学教授
张乾二 学部委员 厦门大学 教授
周绍民 厦门大学教授
林祖庚 厦门大学 教授
查全性 学部委员 武汉大学教授
钱人元 学部委员 中科院化学所研究员
徐光宪 学部委员 北京大学教授
黄金陵 福州大学 教授

五、队伍建设与人才培养

实验室现有固定研究人员27人,固定客座研究人员30余人。固定人员中有博士生导师6人(其中学部委员3人),高级人员占70%。他们中有全国、省、市五一劳动奖章获得者,省、市劳模,国家级有突出贡献的中青年专家,劳动人事部和国家教委联合表彰的作出突出贡献的回国留学人员和作出突出贡献的中国博士学位获得者,国家教委优秀年轻教师。这是一支多学科结合,老中青结合,团结、融洽的队伍。

实验室始终把吸引培养优秀中青年业务骨干放在首位。先后从五十岁左右中年骨干中选拔晋升教授 5名,从35岁左右青年中破格晋升教授4名。物理化学博士后流动站为全国首批建站单位。87年以来先后有12名在国内外获得博士学位的青年到实验室做博士后研究(其中在国外获得博士学位者6人)。此外,还培养了32名博士和72名硕士。

六、国内外合作与对外开放

实验室国内外学术交流活跃。近三年,实验室先后邀请美、日、英、比利时等国的专家10余人来室讲学。同比利时的卢湾大学、英国的 ESSEX大学、德

国的FRITXHABER研究所、日本东京大学、加拿大GUELPH大学等的有关实验室先后建立了科技合作关系，双方互派人员讲学，进行短期科研合作，联合培养博士生。实验室固定人员中先后有10余人应邀赴美国、德国、加拿大、日本、菲律宾、比利时等国家讲学和学术交流。有5人次在国际学术会议上作特邀学术报告，6人次应邀到国外进行短期专题讲学。实验室与国内许多兄弟院校、研究单位建立密切的广泛进行全用研究、学术交流，取得了很好的效果。90年11月与厦门大学化学系共同承办了全国首届年化学学者学术交流会。

实验室实得边建设边开放的措施。近年已先后接待了来自国内外客座研究人员85人月，其中高中级人员40人月，实验室90年2月建成验收后，即着手进行开放课题的申请受理工作，经学术委员会认真审查，先后批准了三批共82项开放课题，总资助金额达90.4万元。实验室还对来室工作的客座科研人员给予生活上，工作上的优惠条件，让他们能更心情舒畅地在这里工作。

实验室将认真贯彻“开放、流动、联合”的宗旨，促进学术思想和人才交流，不断提高我国固体表面物理化学的基础研究和应用基础研究水平，使其成为聚集和培养优秀人才的中心，取得高水平研究成果的基地。

关于厦门大学建立固体表面物理化学 实验室的专家论证意见

关于在厦门大学建立固体表面物理化学实验室的论证会于1986年3月3日到5日在厦门大学召开。会议由厦门大学支持,由国家自然科学基金委员会主任唐敖庆教授任论证会专家组组长,组员(按姓氏笔划为序)有闵恩泽、毕道治、陈怡萱、吴浩青、吴越、钱人元、唐有祺、徐光宪、蔡生民等九名教授和副教授。教委科技司张酉水同志及袁成琛同志、计委任林和杜生同志参加了这次会议。

会议分二阶段进行:首先在厦门大学前副校长蔡启瑞教授主持下,由厦门大学校长田昭武教授介绍了当代固体表面物理化学的发展情况,阐述了在我国建立固体表面物理化学实验室的必要性和重要意义,详细汇报了该校在这方面的基础、几个实验室的负责同志对催化、电化学及量子化学等三个方面的工作又分别作了说明。在此基础上,与会同志参观了厦门大学有关这方面的三个实验室。第二阶段专家组全体同志,根据汇报和参观,就当前在我国建立固体表面物理化学实验室的重要性以及在厦门大学建立这一实验室的可能性和现实性、远景规划及条件等问题广泛交换了意见。由于厦门大学对这次会议作了充分的准备工作,在专家组全体同志的共同努力下会议取得了满意的结果。专家组对在厦门大学建立固体表面物理化学实验室的论证意见如下:

(一)

国内外大量资料表明,以化学吸附、多相催化、界面电现象等为主重内容的固体表面物理化学是化工、炼油、能源、材料、环保等国民经济组成部份的重要科学基础之一。

近二、三十年以来上述工业部门及科学、技术的全面发展大大促进了固体表面物理化学学科的研究并达到了一个新的深度。不少规律已程度不等地在分子、原子水平上加以阐述,同时这些新的研究成就反过来转换成新技术,在新的基础上进一步推动了有关工业不断前进,这种理论和实际相互促进的势头目前仍有增无减。正是由于这个原因,固体表面物理化学被普遍认为是当前世

界科学发展中最活跃的前沿之一。

参加论证的专家们一致指出：我国正处在实现四化的关键时代，无论在对国外引进先进技术的消化，还是在原有工业部门的技术改造方面都会提出一系列科学技术问题，建立固体表面物理化学实验室，开展有关的基础研究，必将更好更快地推动这些任务的完成并有可能在此基础上有所创新。

鉴于上述原因，专家组组员一致同意我国目前有必要在已有较好基础的地方建立固体表面物理化学重点实验室。

(二)

专家组同志根据汇报和参观，对厦门大学物理化学专业的研究工作，有以下几个方面留下了深刻的印象：

1、能较好地根据省内、国内经济建设的需要和学科发展的趋向，选定理论结合实际课题，开展研究工作，既为国民经济建设作出具体贡献，又为学科本身发展形成理论特色，不断丰富科学积累。

2、通过相关分支学科及有关科学之间的密切合作，多兵种协同作战，能在较高水平上解决较为复杂的科学和技术问题，促进学科之间的相互渗透，不断在渐的学科领域内开展工作。

3、自力更生，大力开展新方法的研究和新仪器的研制，在工作中十分重视新技术和新的现代物理方法的应用，把工作不断引向深入。

4、有一个在年龄和专业结构上较为合理的研究梯队；学术思想比较活跃。

5、国内外的学术交流活跃。

6、已建成一个初具规模的物理化学实验室。

专家组全体成员认为厦门大学的物理化学专业历史较长，在固体表面物理化学方面有较好基础，有些工作已接近当前国际水平，在国内外享有一定声誉，完全有条件在此基础上建成一个具有现代水平的固体表面物理化学实验室。

(三)

专家组同志还就固体表面物理化学实验室的研究方向和工作内容、经费概算等问题交换了意见，大家认为，申请在报告中提出的五个方面的研究内容是

在厦门大学过去三十多年扎实的工作基础上提出来的，有一定的特色，作为今后的长远发展方向，专家组认为是合适的。希望以此为依据，进一步确定近期（七、五期间）需要安排的适当课题和待解决的科学问题，争取尽早做出出色的基础性成果。

专家组同志参考申请报告中提出的经费概算以及国家七五期间可能提供的经费（约 500万人民币），建议计委为固体表面物理化学实验室的创建购进国内外仪器、设备。贵重材料和药品提供130万美元和100万元人民币。在购置国外仪器设备时，希对安排的近期课题予以优先考虑

厦门大学建立固体表面物理
化学实验室论证会
专家组
一九八六年三月五日

以门大学建立固体表面物理化学重点实验室论证会
专 家 组 成 员

姓 名	职 务	签 名
唐敖庆 (组长)	学部委员, 国家自然科学基金委员会主任, 中国化学会理事长, 吉林大学名誉校长, 教授。	唐敖庆
以下按姓氏笔划为序		
闵恩泽	学部委员, 中国石油化工总公司石油化工科学研究院付院长, 高级工程师。	闵恩泽
毕道治	电子工业部第18研究所总工程师, 中国电工学会化学与物理电源专业学会主任委员, 高级工程师。	毕道治
陈怡萱	中国科学院大连化学物理研究所教授	陈怡萱
吴浩青	学部委员, 复旦大学教授	吴浩青
吴 越	中国科学院长春分院院长, 研究员	吴越
钱人元	学部委员, 中国化学会理事长, 中国科学院化学研究所学术委员会主任, 教授。	钱人元
唐有祺	学部委员, 北京大学物理化学研究所所长, 北京大学教授。	唐有祺
徐光宪	学部委员, 北京大学教授	徐光宪
蔡生民	北京大学付教授	蔡生民

对厦门大学固体表面物理化学 国家重点实验室的验收意见

根据国家计委对“国家重点实验室建设管理办法(计科1987.825号)”的要求,由国家教委科学技术委员会副主任,中国科学院化学学部委员唐有祺教授等十四名专家学者组成的验收委员会和验收小组于二月十四至十五日在厦门市对厦门大学固体表面物理化学国家重点实验室,进行了检查、评议和验收。

验收期间,验收委员会成员听取实验室主任、建设项目负责人对实验室建设工作的汇报、几年来几个主要学科的工作进展以及几位中青年科研人员的研究工作报告的基础上,对实验室重点试验设备进行了考查;验收小组成员对历年来的财务及仪器设备管理等进行了核实和验收。与会人员根据验收大纲的要求,就实验室的研究方向和目标,在实验室建设过程中完成的主要科研任务和取得的成果,实验室条件和水平,人才培养、经费使用和仪器配备等问题逐项进行认真的讨论和评议。通过有关专家的对口交流,对实验室的发展前景,实验室开放和学术委员会的组成等问题充分交换了意见。验收委员会认为,厦门大学固体表面物理化学国家重点实验室完成了计划任务书(87教技字19号)预期的目标,基本上具备了向国内外学者开放的条件。

根据验收大纲的要求,提出以下验收意见:

一、实验室的研究方向与中、近期研究目标比较明确,当前选择催化、电化学二个有明显应用背景的学科,同时与量子化学相结合,研究固体表面的化学反应速度、机理和控制因素是合适的,有明显的特色。根据上述的方向和任务,在三年的建设过程中,先后承担80项各类研究课题,取得一批成果:发表研究论文 200余篇;获国家自然科学三等奖二项;国家教委科技进步奖五项;省科技进步二等奖一项,申请专利 9件(五件已获专利权);一个催化剂系列产品开发投入生产,工作取得了显著进展。

二、实验室现拥有大型设备39台件,其中进口设备19台件,由于注意了选型,所有已验收的设备,均能很好的用于固体表面的研究;加上依托单位有很好的仪器设计、加工和维修能力,有些自制设备也达到了先进水平。可以比较好地开展固体表面物理化学方面的基础研究。

三、在学术带头人的精心指导下，一批中级研究人才正在茁壮成长，已有16名博士生和15名硕士生实验室做学位论文，6名学成归国的博士后也取得了良好的科研成果。培养工作比较全面，在掌握现代实验技能方面获得了比较好的效果。基本上已经形成一个比较好的科研梯队。

四、已经制订定“实验室暂行管理条例”，“科学基金暂行办法”和“基金课题申请指南（草案）”等制度，在参考其他开放实验室的经验进行必要的修改后，可以作为对外开放的试行方案，并在实践中不断加以完善。

五、按照计委对国家重点实验室的要求，已经组成了由高等院校、产业部门、中国科学院有关研究所等有代表性的专家组成的学术委员会并将申报国家教委批准，开展工作。

六、在建设过程中，在经费使用上，认真贯彻了充分利用依托单位的有利条件，集中使用经费以及专款专用的原则，财务手续清楚，帐实相符，实验室专项建设经费用于购买仪器设备占97%。

验收委员会注意到：

1、由于汇率的变动引起原计划经费购买力下降已造成引进设备零配件及软件不足，影响到仪器设备的功能发挥。建议有关方面能在经费上给予补助。

2、考虑到专业和地区的特点，估计客观上对这个实验室要求有较大的开放度但迄今开放基金尚未落实，需有一笔研究事业费（包括外汇），希上级部门能大力支持予以解决。

验收委员会

1990年2月15

厦门大学固体表面物理化学国家重点实验室验收委员会委员

姓 名	职 务	签 名
唐有祺 (主任委员)	国家教委科学技术委员会付主任, 中国科学院化学学部委员, 北京大学物理化学研究所所长, 教授	唐有祺
以下按姓氏笔划为序		
王弘立	中国科学院大连化物所研究员	王弘立
吴征铠	中国科学院化学学部委员, 核工业总公司科技委常委、教授	吴征铠
吴浩青	中国科学院化学学部委员, 复旦大学教授	吴浩青
吴 越	中国科学院长春应化所研究员	吴越
陈 懿	南京大学付校长、教授	陈懿
钱人元	中国科学院化学学部委员, 中国科学院化学研究所研究员	钱人元
蔡生民	北京大学化学系教授	蔡生民
陈清龙	国家教委科技司计划处处长	陈清龙