



物理化学发展的瓶颈与思路 论坛

国家自然科学基金委员会化学部 主办
固体表面物理化学国家重点实验室 承办

厦 门 2006.11.30–12.3

“物理化学发展的瓶颈与思路”论坛

程 序 册

一、会议简明日程表

11月30日全天 报到（厦门大学国际学术会议交流中心, 逸夫楼大堂）	
12月1日上午 开幕式、报告会（一）（嘉庚主楼220会议室）	
7:00 – 8:20	早餐（逸夫楼餐厅二楼宴会厅 自助餐）
8:30 – 9:00	开幕式及领导讲话
9:00 – 9:30	大会报告1
9:30 – 10:00	照相、休息
10:00 – 12:30	大会报告2与论坛讨论
12:30 – 13:30	午餐（逸夫楼餐厅二楼宴会厅 自助餐）
12月1日下午 报告会（二）（嘉庚主楼220会议室）	
14:00 – 16:00	大会报告3与论坛讨论
16:10 – 16:30	休息
16:30 – 18:30	大会报告4与论坛讨论
18:50	逸夫楼前上车前往环岛游船
19:00 – 22:00	晚餐（环岛游船 自助餐）
12月2日上午 报告会（三）（嘉庚主楼220会议室）	
7:00 – 8:00	早餐（逸夫楼餐厅二楼宴会厅 自助餐）
8:00 – 10:00	大会报告5与论坛讨论
10:00–10:20	休息

10:20-12:30	大会报告6与论坛讨论
12:30 – 13:30	午餐（逸夫楼餐厅二楼宴会厅 自助餐）
12月2日下午 报告会(四)（嘉庚主楼220会议室）	
14:00 – 16:10	大会报告7与论坛讨论
16:10 – 16:30	休息
16:30 – 18:30	论坛发言与讨论
18:50	逸夫楼前上车前往闽南大酒店
19:00 – 21:00	晚宴（闽南大酒店旋转餐厅）
12月3日上午 报告会(五)、会议总结（嘉庚主楼220会议室）	
7:00 – 8:00	早餐（逸夫楼餐厅二楼宴会厅 自助餐）
8:00 – 10:00	大会报告8与论坛讨论
10:00 – 10:20	休息
10:20 – 12:00	会议总结
12:30 – 13:30	午餐（逸夫楼餐厅二楼宴会厅 自助餐）
12月3日下午 可离会	
18:30 – 20:30	晚餐（逸夫楼餐厅二楼宴会厅）

二、会议须知

1. 报到：11 月 30 日。

会务组全天在厦门高崎机场和火车站负责接站。

没有被接到的专家请自行前往厦门大学国际学术交流中心（又称逸夫楼，距离大南校门约 100 米）。

2. 会期：12 月 1-3 日

3. 离会：12 月 3 日下午可离会

4. 地点：厦门大学嘉庚主楼（又称颂恩楼、嘉庚三）220 会议室（凭会议胸卡进入）

5. 会务组：逸夫楼 202 室

联系人：

承办单位：固体表面物理化学国家重点实验室(厦门大学)：

谢兆雄（0592-5341925），王敏（0592-5341093）

电话：0592-2182432，0592-2185667，传真：0592-2183047

E-mail: guozhong@xmu.edu.cn, zxxie@xmu.edu.cn

主办单位：国家自然科学基金委员会化学科学部三处：

杨俊林，高飞雪

电话：010-62327172；传真：010-62327164

E-mail: yangjl@nsfc.gov.cn

6. 逸夫楼电话使用方法：

(1) 房间互拨：2+房号。如房间号 203，电话号码为 2203。

(2) 拨打外线：先拨 0 + 外线号码

(3) 外线拨入：2087988 转 2+房号

7. 就餐：（凭会议胸卡进入）

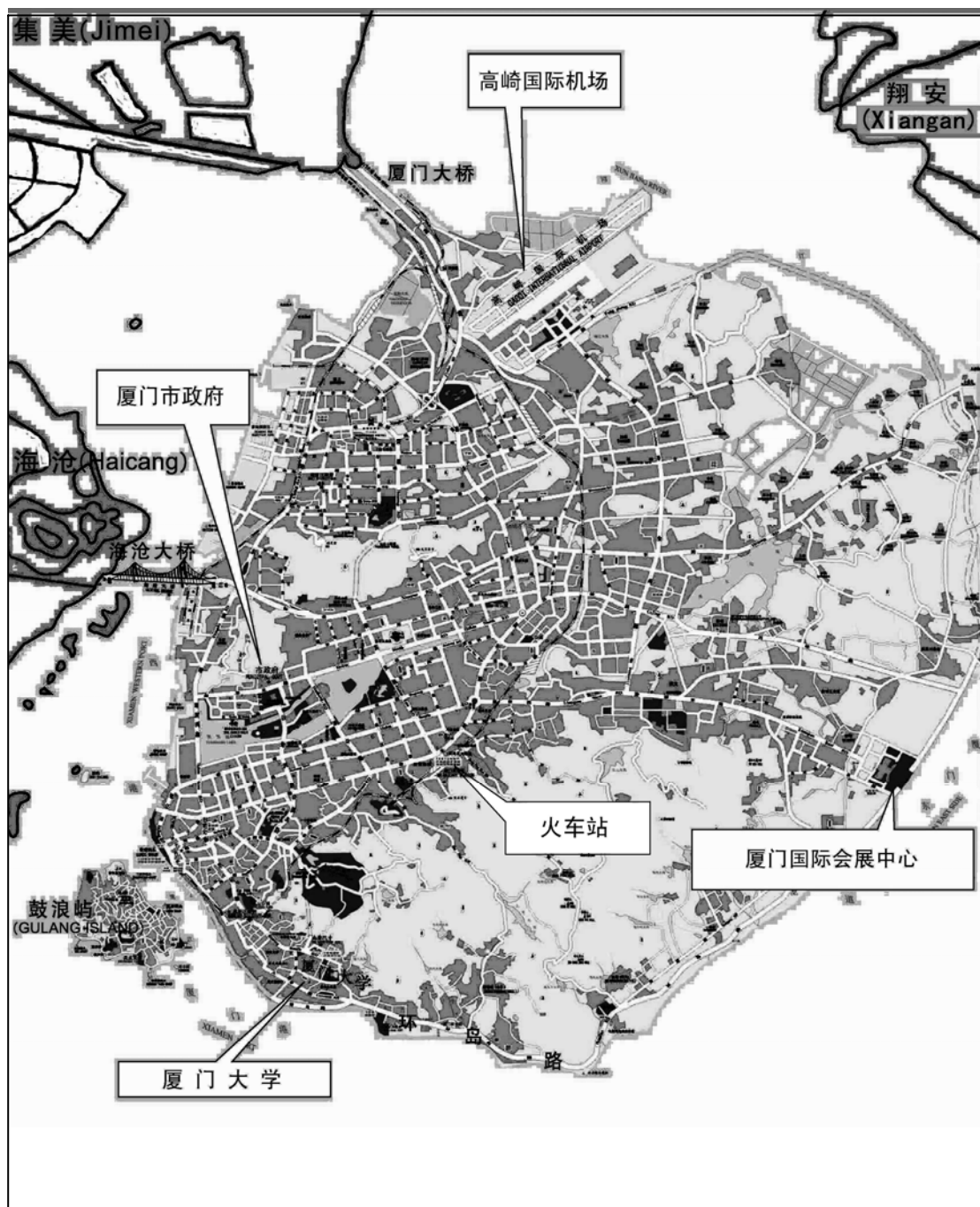
早餐：7:00 - 8:20 逸夫楼餐厅二楼宴会厅 自助餐

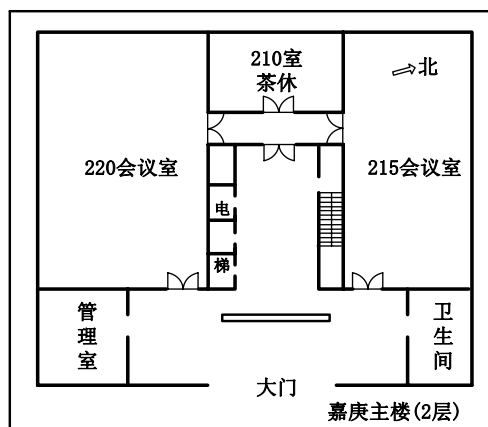
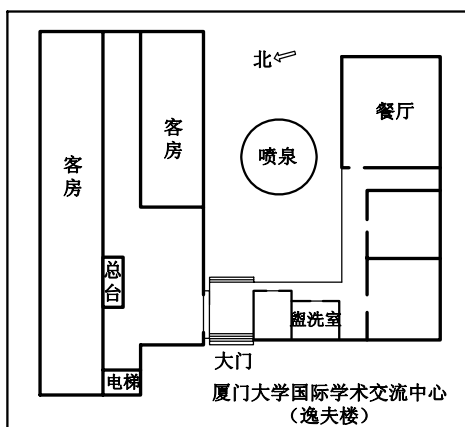
中餐：12:30 - 13:30 逸夫楼餐厅二楼宴会厅 自助餐

晚餐：（见会议简明日程表）

8. 旅游：凭会议胸卡参加。

三、地图





目 录

(按照作者的姓氏字母排序)

纳米约束体系的催化特性.....	包信和 (1)
(离子)软物质中的物理化学.....	邓友全 (2)
理论及计算化学发展的瓶颈与思路.....	方维海 (3)
光催化学科发展面临的几个问题与几点思考.....	付贤智 (4)
磁性纳米晶体的生物医学应用.....	高明远 (5)
绿色化学中的化学热力学.....	韩布兴 (6)
阿秒分辨的电子动力学.....	韩克利 (7)
我国胶体与界面化学发展的特色和问题思考.....	郝京诚 (8)
低碳能源研究.....	贺鹤勇 (9)
物理化学在环境微界面过程研究中的挑战和机遇.....	贺泓 (10)
分子尺度的量子调控中若干物理化学问题.....	侯建国 (11)
关于物理化学及学科交叉的若干随想.....	胡征 (12)
工欲善其事,必先利其器.....	江雷 (13)
物理化学在生命科学和创新药物研究中具有广阔的天 地.....	蒋华良、沈旭、陈凯先 (14)
生物物理化学的发展趋势、学科交叉特点与人才培养的困惑	来鲁华 (15)
促进我国在理论与计算化学学科开展原创性和系统性工作的一点建议	黎书华 (16)
太阳能光催化制氢研究.....	李灿 (17)
Frontiers in Electrochemistry.....	李景虹 (18)
化学基础研究与学科前沿.....	梁文平 (19)
物理化学应着力主动性的学科交叉融合.....	林昌健 (20)
胶体与界面化学发展的几点思考.....	刘鸣华 (21)
加强国家自然科学基金对物理化学研究队伍建设的作用	刘世林 (22)
小尺度反应、尺度效应与单分子检测.....	刘忠范 (23)
从我国燃料电池发展看基础研究的重要性.....	陆天虹 (24)
胶体化学在无机微纳结构形貌控制合成方面面临的机遇和挑 战.....	齐利民 (25)

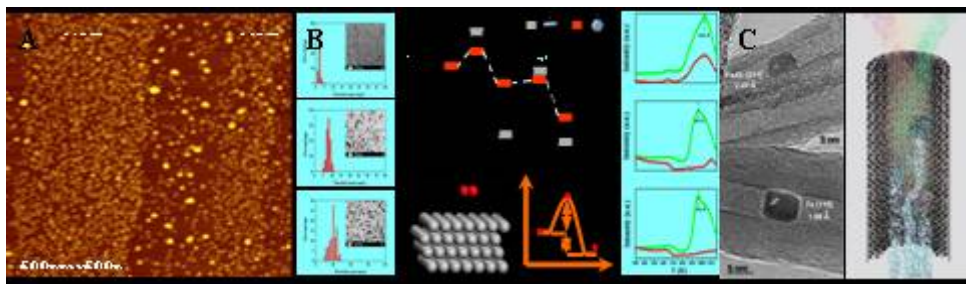
理论化学：机遇和挑战.....	邵久书 (26)
分子与高分子功能材料器件的理论化学研究前沿.....	帅志刚 (27)
分子以上层次的一些结构化学问题.....	苏成勇 (28)
立足基础、瞄准方向、持之以恒——关于物理化学学科如何开展系统性、原创性研究工作的体会.....	孙世刚 (29)
关于物理化学发展的瓶颈问题的思考.....	孙予罕 (30)
物理化学学科现状和电化学研究难点之管见.....	田中群 (31)
重视多相催化反应过程的分子基础研究.....	万惠霖 (32)
当前物理化学发展中的几个前沿问题举例.....	万立骏 (33)
物理化学发展趋势的若干思考.....	王琛 (34)
物理化学的发展与社会——物理化学发展的人才和资源瓶颈.....	王鸿飞 (35)
融合仿生、均相、多相催化领域的研究，寻找实现挑战性催化反应突破的思路.....	王野 (36)
发展金属纳米簇基催化剂面临的挑战.....	王远 (37)
“眼中有科学，胸中无学科”：对物理化学学科的发展战略的一点思考.....	翁羽翔 (38)
小尺度表面的物理化学研究.....	吴凯 (39)
超分子光化学.....	吴骊珠、佟振合 (40)
理论与计算化学发展的思考.....	吴玮 (41)
结构化学的一些发展趋势.....	吴新涛 (42)
学科融合对物理化学领域催化化学发展的促进.....	夏清华 (43)
分子筛催化材料研究的某些特点、趋势和局限性.....	肖丰收 (44)
多相催化中的纳米尺寸效应.....	徐柏庆 (45)
加强密度泛函理论的研究与应用.....	徐昕 (46)
分子器件的定量描述和设计.....	杨金龙 (47)
我国实验物理化学研究的机遇和挑战.....	杨学明 (48)
固态物理化学研究的前沿及发展趋势.....	杨勇 (49)
凝聚态的光化学过程及特性研究.....	姚建年 (50)
理论分子反应动力学的发展瓶颈.....	张东辉 (51)
超分子物理化学的进展与动态.....	张希 (52)
化学生物学——物理化学的一个生长点.....	赵新生 (53)

纳米束约体系的催化特性

包信和

(中科院大连化物所, 催化基础国家重点实验室, 大连 116023)

与表面催化相关的关键步骤, 如表面吸附、反应和脱附等均涉及到表面电子 (特别是价电子) 与反应物种之间的电子传递, 催化剂表面价电子的分布对催化相关的特性, 如活化能垒等具有较强的调制作用。催化剂的设计, 除对结构的调变外, 往往都是对催化剂电子性质, 特别是价电子性质的修饰。迄今为止, 人们通常采用改变催化剂活性中心的化学组份, 如增加组份或添加剂等, 或通过选择载体来调节催化活性组份与载体的相互作用 (SMSI 效应) 等方法来调制催化剂的电子性质。最近发展起来的纳米催化技术使人们得以不改变催化剂的化学成分, 而仅仅通过变化 (主要是降低) 催化剂粒子的尺寸达到改变催化剂表面电子性质的目的。现有的研究表明, 基于纳米粒子的催化理论研究存在一些问题: 一是现有的技术很难获得尺寸和组份均一的纳米粒子; 二是获得的纳米粒子很难被隔离, 担载后往往出现较强的载体相互作用, 难以获得其本征特性; 再则, 由于纳米粒子较强表面能的存在, 对温度和环境较为敏感, 很难得到洁净、稳定的纳米粒子体系。本报告以二维纳米薄膜 (图 A), 零维纳米粒子 (图 B) 和一维纳米碳管 (图 C) 等体系的催化为例, 讨论量子阱态理论和量子尺寸效应以及纳米碳管对催化物种的量子束约效应等在催化中的影响, 试图加深从分子水平上对催化过程的认识和理解。



参考文献:

1. T.-C. Chiang, Photoemission studies of quantum well states in thin films, Surface Science Reports, (2000).
2. Y. Guo and Q. K. Xue et. al., Superconductivity modulated by quantum size effects, Science, (2004).
3. T.-C. Chiang, Superconductivity in thin films, Science, (2004). D. W. Goodman, Catalytically active Au on titania: yet another example of a strong metal support interaction (SMSI), Catalytic Letters, (2005),
4. L. Aballe and M. Kiskinova et. al., Tuning surface reactivity via electron quantum confinement, Physical Review Letters, (2004).
5. Junming Sun, Ding Ma, He Zhang, Xinhe Bao et.al, Toward Monodispersed Silver Nanoparticles with Unusual Thermal Stability, JACS (2006)

（离子）软物质中的物理化学

邓友全

（中国科学院兰州化学物理研究所 绿色化学与催化中心

兰州 730000）

各学科的交叉和学科的界限的淡化是当代自然科学研究发展的特征，物理化学学科唯主动地融入其中，方为突破当前发展瓶颈之上策。

1991 年，诺贝尔奖获得者、法国物理学家热纳(P.G.De Gennes)提出了“软物质”（soft matter or soft material）的概念。一般地讲，软物质是指易于发生变形的那类物质。如液晶、橡胶、胶体、膜、泡沫、颗粒物质、生物体等。软物质的基本特性是柔软性、活跃性以及对外界微小作用的敏感和响应性，从而构成丰富的物理化学内涵和广泛的应用背景。

近年来，美国及欧洲的主要物理学杂志均开辟了“软物质物理”新栏目，并成为一门新的学科领域。软物质物理是世纪之交物理学与化学、生命科学和材料科学交叉的新生长点。目前，物理学科研究软物质相当活跃。化学家特别是物理化学家也应用其特有的思维、角度来研究发展软物质。离子型软物质应该是传统软物质家族中新的一员，是物理化学研究的新领域。

建议从以下几个方面（但并不局限于此）多学科开展研究：

1. 新型软物质的创制：离子型的、功能型的、智能性的、有极端物理化学性质的；
2. 表面、界面结构和性质：特别是软物质－软物质界面物理化学；
3. 低维软物质构建和性质：纳米效应；
4. 外场作用：自组装、相变、选择溶解、亲润性等物理化学性质的改变和调控；
5. 静电作用力：离子软物质特有的性质；
6. 软物质的环境相容性：毒性与可降解性。

理论及计算化学发展的瓶颈与思路

方维海

(北京师范大学化学学院 北京 100875)

近年来理论化学在我国得到了大的发展,其平均水平与欧洲和美国的差距越来越小,但仍缺乏国际一流的理论化学家,在国际理论化学界的影响还很小。存在这些问题的原因是多方面的,但我认为发展具有自主知识产权的电子结构计算软件包是我国理论化学发展的主要瓶颈之一。

目前国内基本情况是,各个研究组自己发展和改进理论方法,自己编写程序。发展的程序缺乏共性、基础性和兼容性;程序功能单一,很难推广使用。至于如何解决这一问题,我们的思路是:首先从基础做起,完成 HF 自洽场、DFT、MP2、SDCI 和 QM/MM 等计算模块,搭建最基本的、具有兼容性电子结构计算平台;在此基础上,整合国内和国外的理论方法和程序的计算资源,逐步完善其功能;此外,可以国际上有影响的软件包为基础,联合开发我们具有产权的电子结构计算软件包。

光催化学科发展面临的几个问题与几点思考

付贤智

(福州大学光催化研究所 福州 350002)

光催化学科是催化化学、光电化学、半导体物理、材料科学和环境科学等多学科交叉的新兴研究领域。光催化以其在环境和能源等方面的重大应用背景成为近年来国内外最活跃的研究领域之一。从理论和应用上解决可见光光催化和提高光催化过程效率这两个重大难题,是当前国际光催化领域的研究前沿与热点。近年来国内外围绕这些问题开展了大量研究工作,无论是基础研究还是应用研究都取得了重要进展。在国家自然科学基金委员会和其它部门的大力支持下,我国的光催化研究整体上已进入快速发展期,成为国际光催化领域的一支重要研究力量,从2004年开始我国的光催化研究论文数已跃居世界第一。

从光催化学科的发展现状看,该学科进一步发展仍有几个瓶颈问题亟待解决:

1. 光催化基础理论研究不够系统深入,多相光催化反应机理和制约光催化过程效率的关键因素尚不十分明确。以半导体能带理论为基础的光催化理论难以解释许多实验现象,使得设计和开发新型高效光催化剂的研究工作盲目性大。
2. 可见光诱导的高效光催化过程问题仍未得到根本解决,极大制约了光催化技术的广泛工业应用。近年来虽然报道了许多新型可见光光催化剂,但大多存在量子效率低、结构和性能稳定性差等问题。
3. 我国光催化基础与应用研究的原创性成果不多。有重大影响的基础研究论文很少,大多数论文发表在一般性国内外期刊上。应用研究和工程化研究相对滞后,新技术、新产品的开发和产业化步伐缓慢。

鉴于国际光催化学科的发展现状和趋势,在目前和今后一个时期应着重开展如下创新性的基础和应用基础研究:(1)可见光诱导的高量子效率和稳定的新型光催化剂的研究;(2)深入的光催化反应机理研究和基于分子水平的光催化理论体系的探讨;(3)光催化在环境污染治理、光解水制氢和光催化膜功能材料等领域的应用基础研究。

磁性纳米晶体的生物医学应用 ——交叉学科研究的一些感想

高明远

(中国科学院化学研究所 北京 100080)

无机纳米晶体,尤其是荧光量子点和磁性纳米晶体材料在过去二十年已经向世人展示出广阔的应用前景。在过去4年中,我们开展了系列磁性纳米晶体的制备及生物应用研究,并取得了一些阶段性的研究进展。

磁性纳米晶体的生物体内应用是一个高度学科交叉的科研领域,在这一领域中,物理学、化学、材料学、生物学、药学乃至临床医学等学科都将被高度地集成到一起。

在本报告中,我将将主要结合本人课题组所开展的研究工作,探讨交叉学科研究所面临的问题及困惑。

绿色化学中的化学热力学

韩布兴

(中国科学院化学研究所 北京 100080)

化学热力学是物理化学的主要分支学科之一，其原理具有高度的普适性和可靠性。体系的化学平衡、相平衡、热平衡、分子构象的稳定性、分子间的聚集与解离平衡等许多重要问题都需用化学热力学的原理和方法进行判断和解决。因此，化学热力学在化学学科发展过程中具有重要的作用。科学技术的发展对化学热力学不断提出新的和更高的要求。这主要表现在两个方面，一是与化学热力学交叉的新问题的不断出现；二是迫切需要解决多年来一直没有解决的重要化学热力学难题。发展化学热力学理论、方法和手段，解决生命科学、环境科学、材料科学、资源开发利用等领域的重大难题，无疑具有十分重要的意义。

近年来，绿色化学引起人们的普遍关注。它的目标是从无毒、无害、易得或可再生的原料出发，经过高效、选择性强和“原子经济性”好的反应过程，制备环境友好的化学产品，从源头上消除污染，并且经济合理。实现化学过程的绿色化，需要人们重新考虑许多化学问题，其中许多是化学热力学问题，发展有关热力学理论、研究绿色化学中的化学热力学问题必将有效地推动绿色化学和社会的可持续发展。

在此次研讨会上，将针对绿色化学中的一些化学热力学问题进行探讨，希望得到与会专家的指导。

阿秒分辨的电子动力学

韩克利

(中国科学院大连化学物理研究所 大连 116023)

近年来超短激光脉冲取得了重大突破,其突出的标志是阿秒脉冲激光的产生、测量和应用[1-3]。这一结果的取得,标志着人们已从对原子、分子瞬态动力学的研究深入到了对原子内部电子瞬态动力学行为的认识。这将导致在物理、化学、生物等领域中许多研究方向产生极具创新意义和挑战性的重大发现[1]。伴随着阿秒激光的产生和应用,描述电子在激光场运动的阿秒动力学理论在最近两年也取得了一些进展,但还没有一个成熟的理论为大家公认。因此,阿秒动力学实验和理论是最近两年大家关注的重点和热点[4]。国内在这方面有一定的差距,代表性的工作中国科学院大连化物所最近发展了一种可以展了一种可用于描述电子和原子核波包运动的阿秒分辨的精确量子力学方法,并采用此法首次计算了在强激光场下,电离电子与离子(D_2^+)再碰撞几率[5]。

- [1] *Chemical & Engineering News*, Vol. 80, Oct.28(2002)
- [2] Krausz K., et al., *Science* 297, 1144 (2002)
- [3] Niikura H, Legare F, Hasbani R, et al, *Nature* 421, 826(2003).
- [4] Levesque J, Corkum P. B., *Can. J. Phys.* 84, 1(2006)
- [5] Hu J, Han K. L., He G. Z., *Phys. Rev. Lett.* 95, 123001(2005).

我国胶体与界面化学发展的特色和问题思考

郝京诚

(山东大学胶体与界面化学教育部重点实验室, 济南 250100)

从三个方面思考了我国胶体与界面化学发展的特色、发展和存在问题。I) 对我国胶体与界面化学研究的最近几个代表方面做了介绍, 包括: 1) 新型有序分子组合体的构建和应用; 2) 在微纳米功能材料合成中的应用和新进展; 3) 基于离子液体的表面活性剂自组织规律的探究。II) 胶体与界面化学的发展前景与趋势, 特别对当前国际前沿领域的研究进行了叙述。III) 我国胶体与界面化学专业在国际化学界的地位。

对国家自然科学基金委员会资助我国胶体与界面科学基础研究的重点提出了自己的看法: 新的胶体与界面化学理论, 如有序聚集体的形成理论的研究, 新理论与传统理论的重叠和拓展研究, 是目前我国与世界胶体与界面化学研究的融合点, 也是一个难点, 国家自然科学基金委员会应该考虑在这方面的倾斜资助!

低碳能源研究

贺鹤勇

(复旦大学化学系 上海 200433)

国家中长期科学和技术发展规划纲要中，能源是我国科技发展的战略重点之一。近来，英国和欧洲提出了低碳能源技术研究计划。据不完全了解，数年内，众多大学和与能源相关的公司将参与研究。此计划所涉及的部分研究内容与物理化学学科有关，并与国家中长期科学和技术发展规划纲要中有关能源的部分内容相近。

低碳能源技术研究计划中与物理化学学科有关的研究涉及氢能、燃料电池、太阳能利用和生物能源等。

氢能研究主要为产氢和氢的储运，包括用于氢驱动汽车加氢之用的小规模高效制氢系统，及为克服储运压缩和低温氢的缺点，发展新型固体储氢材料等。

在燃料电池方面，可进行的研究包括降低贵金属催化剂的用量，开发廉价的新型催化剂等。

在太阳能利用方面，主要发展新型太阳能电池材料，降低成本，探索新的太阳能利用技术。

生物能源方面，包括研究和发展经济、先进的能源转换技术及其反应机理。

在以上的关键科学问题研究中，既有涉及与物理化学有关的反应、材料制备和表征、理论计算等，又包含了与材料等学科的交叉研究内容。

另外，作为一个潜在的储量巨大的能源——甲烷水合物，是否可考虑从物理化学学科出发，对其进行前瞻性的研究，为将来甲烷水合物的利用提供支撑。

物理化学在环境微界面过程研究中的挑战和机遇

贺 泓

(中国科学院生态环境研究中心 北京 100085)

环境微界面过程是污染物转移转化的最基本过程,也是研究控制环境污染的物理和化学手段所必须的理论基础。目前环境微界面过程研究领域正处于方兴未艾的萌芽阶段。研究环境微界面过程必须具备在复杂条件下的原位表征环境微界面及其过程的物理化学手段和相应的研究方法。缺乏相应的研究手段和研究方法是制约本领域发展的主要原因。

建议在定性表征、定量表征和形貌表征三方面建立和完善环境微界面过程的原位物理化学研究方法体系。定性表征方面重点发展可用于复杂条件下的原位分子光谱技术(原位红外、原位拉曼等),重点研究环境界面微观结构、构-效关系、界面反应中间体和反应机理。定量表征方面重点发展基于原位取样的质谱技术(微界面毛细管取样质谱,努森池质谱等),重点研究污染物在环境微界面上化学反应动力学、反应速率、物质转化通道、物料平衡等问题。形貌表征方面重点发展环境微界面形貌原位连续观测的显微技术(原子力显微镜,扫描隧道显微镜),实现环境界面微观过程的显微形貌直接观察。在此基础上,发展各种环境微界面原位物理化学表征手段之间的匹配和联用技术及其相应的研究方法。深入研究环境微界面过程有望揭示环境污染化学和环境变化的最基本规律,并发展基于环境微界面过程的污染控制新原理和新技术。

分子尺度的量子调控中若干物理化学问题

侯建国

(合肥微尺度物质科学国家实验室, 中国科学技术大学
合肥 230026)

20 世纪科学技术的成就, 很大程度上依赖于人们在原子分子层次上揭示了自然界的奥秘。分立能级结构、波粒二象性、测不准关系、隧穿效应、几率波等量子现象的发现, 不仅使人类对自然界中许多现象和过程的认知有了质的飞跃, 而且极大地促进了各种高新技术的发展。分子的尺度一般在纳米量级, 是典型的量子体系。当物质在某一维度的大小达到分子尺度时, 体系将具有显著的分立能级结构, 其平均能级间距远大于温度引起的能量涨落, 从而表现出各种奇特的量子效应。量子调控研究也因此被列为《国家中长期科学与技术发展规划》的 4 项重大科研计划之一。

分子尺度体系的性能不仅取决于能级结构, 而且跟波函数的位相和空间分布、以及波函数与环境、外场的耦合密切相关。对分子尺度的量子行为和调控的研究, 要在波函数工程的层次上, 通过物理与化学手段来认识和调控分子量子态的分立能级结构、时空分布和相干特性, 探索全新的量子现象, 认识和控制分子量子体系的电荷输运特性和光电转化行为, 研究信息存储、传输和处理的科学原理, 实现基于量子力学效应的新量子器件, 探索对量子涨落和退相干等挑战性问题的解决方案。本报告将对该前沿领域中若干重要的科学问题进行讨论:

- (1) 单分子在空间、能量、时间域的高分辨高灵敏表征方法;
- (2) 单分子的能级与波函数调控;
- (3) 单分子及其耦合体系的电荷与自旋输运特性;
- (4) 单分子光电行为的光子态调控及其能量转换动力学。

关于物理化学及学科交叉的若干随想

胡 征

(南京大学化学化工学院 南京 210093)

科学技术发展的一个突出特点就是多学科交叉、渗透和融合，物理化学学科自身就是化学学科和物理学科交叉融合的产物，其结果是促进了一系列化学的革命性变革，20 世纪诺贝尔化学奖获得者中有一半以上是从事物理化学领域研究的科学家。同时，作为化学基础学科，物理化学又成为新的交叉学科形成和发展的重要基础，物理化学的原理、成就和研究方法已经广泛深入地渗透到材料、生命、环境等领域，交叉融合地产生了一些新的生长点。物理化学已经取得的成就得益于学科交叉，其进一步的大发展也将继续源于多学科交叉，取决于物理化学学科在解决当今人类面临的重大科学问题时发挥的作用。本人将结合自己在化学、物理、材料的交叉学科领域进行探索的感受及所从事的纳米科技领域的研究动态，谈谈对于物理化学学科发展及多学科交叉问题的一孔之见。

工欲善其事，必先利其器

江 雷

(中国科学院化学研究所 北京 100080)

随着科学的迅速发展和各门学科之间的相互渗透，物理化学与物理学、无机化学、有机化学等学科在内容上存在着难以准确划分的界限，从而不断地产生新的分支学科，例如物理有机化学、生物物理化学、化学物理等。纳米科技的发展，促进物理化学产生了新的重要交叉科学的分支，特别是电子显微镜等检测仪器的的发展，使物理化学这个学科对国民经济的促进作用上升到一个新的前所未有的高度。

物理化学相关仪器的发展应从以下三个方面入手：1. 新原理检测设备的研制。2. 在现有仪器设备的基础上研发新功能。3. 已有设备的国产化。作为物理化学表征手段的检测仪器的开发与产业化，是发达国家竞相争夺的战略制高点之一。而目前我国绝大多数的物理化学检测的仪器设备均采用欧、美、日等国家的产品，自主研发的设备占有的市场份额很少，每年仅仪器设备一项，就有上亿外汇流向欧、美、日等国家。在物理化学的竞争，越来越归结为检测仪器装备的研发与产业化的时候。我国物理化学在新世纪的发展，亟需加强仪器设备方面自主创新能力。面向关键技术及应用，发展新型纳米尺度的结构分析、性能测试技术及关键设备，新型纳米结构加工技术及关键设备，改变我国物理化学检测设备落后的被动局面。只有我们发展自己的检测技术及仪器制造业，才能从源头上进行自主创新，才能摆脱对国外设备的依赖性，才能突破发达国家对我国的高技术封锁，才能实现由输血向造血的转变，促进我国未来高新技术产业的发展。

物理化学在生命科学和创新药物研究中具有广阔的天地

蒋华良^{1,2}, 沈旭^{1,2}, 陈凯先¹

(¹中国科学院上海药物研究所, ²华东理工大学药学院 上海
201203)

生命科学的发展和创新药物研究离不开物理化学, 例如 1909 年 A. V. Hill 发根据质量作用定律推导的药效与药物浓度及药物与受体结合常数关系的 Hill-Langmuir 方程是整个药理学的基础。之后, 物理化学的基本原理逐步应用于生物科学的各个领域, 特别是热力学和动力学原理在酶反应动力学中的应用, 促进了酶学学科的发展。现在, 经典化学热力学和动力学在生命科学中的应用更加广泛和深入。差热分析仪的精度已经达到纳卡, 生物传感器可以在组织、细胞和分子水平上实时测试分子间相互作用、蛋白质折叠过程的热力学和动力学变化等。从内容上, 物理化学已经有所扩展, 以前以热力学和动力学研究为主, 外加理论化学(量子化学)。现在大量计算化学的内容, 包括计算量子化学、分子力学、分子动力学和分子模拟的内容已经充实到物理化学的研究范畴。计算化学已经发展到实用化的水平, 能精确预测化学反应的机理; 我们可以将模拟蛋白质构象变化和功能的的关系、计算药物和受体的相互作用、设计新的生物活性分子的内容归属于物理化学的内容。目前发展比较快的新的研究方向和学科, 如功能基因组学、蛋白质组学、系统生物学和化学生物学以及高内涵筛选等创新药物研究的新方向, 迫切需要新的物理化学理论和测试方法, 物理化学在生命科学和创新药物研究中具有广阔的天地。因此, 我建议物理化学的同仁们联合起来, 向生命科学进军, 向创新药物研究领域进军。

生物物理化学的发展趋势、学科交叉特点与人才培养的困惑

来鲁华

(北京大学化学与分子工程学院, 北京 100871)

生物物理化学是物理化学与生物学交叉而产生的一个学科方向, 也可以看成是物理、化学与生物学三门学科交叉而成的学科方向。目前的主要研究内容可以分为: 采用理论与模拟的方法研究生物分子折叠、相互作用与生物体系调控机理; 采用结构生物化学的手段研究生物分子结构、大复合物的结构及生物体系调控机理; 采用热力学的手段研究生物分子相互作用、活细胞中的相互作用; 采用动力学的手段(包括单分子技术)研究生物分子折叠、相互作用、酶反应与生物体系调控机理(*in vitro* 及 *in vivo*); 针对特定的生物学问题, 综合应用各种理论与实验的研究手段。

生物物理化学的发展有这样几个特点: (1) 学科的界线越来越模糊, 很多生物物理化学相关的研究中心或研究生培养计划都是由不同学科的人员构成的, 如何寻找重要的生物学问题并进行深入研究变成了最大的挑战。原来物理化学背景的研究者越来越多地参加生物学相关的学术会议, 并在生物学相关的杂志上发表论文。(2) 新的理论研究方法和实验手段的引入, 对于整个领域的发展起到了重要推动作用; 一些较为传统的研究方法在生物体系的研究中得到了发扬光大。

在相关人才培养中, 一方面要求物理化学背景的研究生大量深入地学习生物学相关的课程, 要求物理背景的研究生大量深入地学习化学与生物学相关的课程, 要求生物学背景的研究生大量深入地学习物理与化学相关的课程, 同时又要求他们在原有的学科中能够得到专门的培养与训练, 是一件非常困难的事情。在国外与国内大学的教师引进过程中, 这种矛盾与困惑更加突出: 目前从事生物物理化学研究的教授们自己培养的研究生都是做跨学科研究的, 由于他们花费了大量的时间与精力来学习生物学知识并做相关的研究, 在物理化学本学科的学习与训练上花的精力大为减少; 但招新教师却倾向于引进物理化学背景强同时又做过生物学研究的人, 构成了一个矛盾。类似的情况在物理化学与其它学科交叉的研究方向上同样存在, 需要进行深入的探讨。

促进我国在理论与计算化学学科开展原创性和系统性工作的一点建议

黎书华

(南京大学化学化工学院 南京 210093)

在物理化学学科中,理论与计算化学的主要目标是发展化学学科的理论
与计算方法、提出新概念,并通过理论计算解释和预测化学学科及其它相关
学科(如生命科学、材料科学、环境科学等)的实验现象。最近几年来,我国
的理论计算化学发展势头很好,在量子化学的基础理论和计算方法、复杂分
子动力学理论、功能分子材料与器件理论等领域取得了一批具有国际影响的
成果。在应用计算化学解释和阐明催化机理、生物大分子和纳米材料的结构
和性能等方面也取得了显著的成绩,推动了这些学科在中国的发展。但是应
该看到,我国在理论方法发展方面与国际相比整体上还是较弱,在国际上的
影响还不够大。特别是在一些交叉和新兴方向上我国的研究力量还比较薄弱
(如从头算分子动力学方法,非绝热反应,凝聚相的动力学理论和统计力学
研究等)。我国在计算化学应用方面虽取得了许多成果,但许多研究还缺乏系
统性,因而难以产生重要的国际影响。为了更好地推动理论与计算化学在中
国的发展,建议:

- (1) 基金委在对申请项目进行科学评价时,应特别考察理论方向项目的原
创性(及潜在的应用性)和计算化学应用方向项目的系统性,用不同
的评价标准来正确地评价这两类项目的科学价值(这也是国际上通行的
做法)。对理论方向项目的资助数目应适当倾斜,以鼓励我国的理论
化学工作者在一些国内较弱或新兴方向上迎头赶上。
- (2) 在重点项目立项上,建议尝试采用自由申请的方式(注明为面上或重
点),以保证遴选出来的重点项目的质量。另一方面,即使在某一方向
上已设立了重点项目,如果另一申请人在此方向有他(她)自己独到的
思路且已取得很好的前期基础,也可以考虑资助。即不必过分计较
重点项目的题目。

太阳能光催化制氢研究

李 灿

(中国科学院大连化学物理研究所)

催化基础国家重点实验室 大连 116023)

利用太阳能光催化制氢是解决能源和环境问题的重要途径之一,受到日本、美国、欧洲国家等发达国家的高度重视。在过去的二十多年中,光催化制氢主要集中在紫外光区,取得了重要进展,量子效率已突破 50%。但在地面上太阳光的紫外光部分仅占其整个光谱的 4% 左右,而潜在可利用太阳光制氢的光主要分布在可见光区(约占太阳光的 43%),因此,进入二十一世纪后,人们把重点集中在太阳能可见光区光催化制氢研究方面,设计合成可见光区高活性、廉价的光催化材料已成为此领域重要的研究方向。近两年来,这方面的工作进展很快,已报道的可见光区($\lambda > 400\text{ nm}$)分解水制氢的实验室量子效率可达到 2% 左右,若量子效率能达到 10% 以上,则可能有工业化前景。

太阳能光催化制氢可以有下述几个主要反应:

光催化分解水制氢: $\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2 + 1/2\text{O}_2$ (1)

光催化 CO_2 加氢: $\text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CH}_3\text{OH} + 3/2\text{O}_2$ (2)

光催化重整生物质制氢: $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6 + 6\text{H}_2\text{O} \rightarrow 12\text{H}_2 + 6\text{CO}_2$ (3)

光催化分解污染物制氢: 例如, $\text{H}_2\text{S} \rightarrow \text{H}_2 + \text{S}$ (4)

可以看出这些反应的意义很重大,不仅利用太阳能制氢,而且还可解决重大环境问题,例如减少 CO_2 排放问题。但是上述反应均为热力学上困难的反应,尤其反应(1)和(2)的 $\Delta G > 200\text{ KJ/mol}$,利用太阳能来驱动,则需要高效的光-化学能转换催化剂,面临巨大的挑战。

太阳能光催化制氢反应的研究不仅具有重大应用背景,一旦突破将会对世界经济产生巨大影响,而且是一个基础性很强的大科学课题,它涉及催化化学、电化学、生物、光电转换等领域的核心科学问题,这一研究将带动和促进相关学科的发展。

太阳能光催化制氢是具有战略意义、应用背景重大、探索性很强的基础研究,虽然目前离大规模应用尚有一定距离,但日本、美国等国家加大这方面的科技投入,且不断取得研究进展。这一情况不可忽视。我国的太阳能光催化制氢研究方面有一定的基础和队伍,若能及早重视和支持,将会在这一领域占一席之地,甚至可能做出重大贡献。

Frontiers in Electrochemistry

Jinghong Li

(Department of Chemistry, Tsinghua University, Beijing 100084)

1. Interfacial Bioelectrochemistry: Fabrication, Properties and Applications of Functional Nanostructured Biointerfaces

There still remain a number of challenges related to the investigation of nanostructured biointerfaces. Many of these challenges are related to the processing of the nanostructured biointerfaces in order to modify the electrodes in a more controlled way. Considerable advances in some of these challenges have already been made. For instance, a number of approaches to reducing non-specific adsorption onto the walls of nanotubes have been established. There is, however, considerable scope for more research into all these challenges. Apart from preparation issues the next stage of research into nanostructured biointerfaces is expected to proceed in the fundamental research. So far, we are still at a fairly early stage of understanding fundamental theories of the bioelectrochemical systems. The mechanism of charge transport in nanostructured biointerfaces still remains an intriguing issue and needs to be explored further. Nevertheless, the advances in the last decades have been significant and have focused strongly on the understanding of the nanostructured biointerfaces.

2. Improvement of Solar Energy Conversion by Controlling Composition and Morphology of Nanostructures in Photoelectrochemical Cells [3]

The crucial issue for improving the efficiency of the solar energy conversion is to control the charge separation/transport processes and the recombination mechanisms in the semiconductor/electrolyte interface.

3. Porous, Self-Supported, Nanoarchitected Electrode Operating through Efficient Lithium-Driven Conversion Reactions

4. Novel system in Electrochemistry: Room Temperature Ionic Liquids

化学基础研究与学科前沿

梁文平

(国家自然科学基金委员会化学科学部 北京 100085)

进入 21 世纪以来,我国化学基础研究发展迅猛,在国际上发表论文数和被引用次数连续几年列国内各主流学科之冠,高水平论文持续增长,在国际组织和期刊中任职的中国化学学者越来越多,国际化学组织和机构来访的需求不断增长,国际合作的项目与共同发表的学术论文呈现逐步增长的趋势,中国化学家和中国化学学科在国际上影响力大大增强。与此同时,化学在解决人类社会面临的重大挑战和提高人类生存质量中发挥着重要的不可替代的作用。本文介绍我国近年来化学基础研究发展情况及其在国际上的地位,简要介绍欧洲化学界提出的可持续化学的理念与内涵以及国际上提出的分子科学前沿,同时对物理化学学科如何进一步凝练重大科学问题、做好与物理、生命等学科交叉以及如何活跃学术研讨等提出几点建议。

物理化学应着力主动性的学科交叉融合

林昌健

(厦门大学固体表面物理化学国家重点实验室 厦门 361005)

化学和物理合在一起，在自然科学中形成了一个轴心，物理化学是用物理学的原理和方法来研究化学变化的学科。正是由于物理化学本身就是一门交叉融合的学科，所以从诞生之日起，就成为一门生机勃勃、能与自然科学发展紧密联系学科，在人类认识自然、揭示规律，探求新知、拓展方法的进程中扮演着极其重要的作用，并不断创造了大量科学研究的辉煌。

当代科技发展最重要的一个特征和趋势仍然是科学的交叉融合。当前众多科学前沿，包括生命过程、凝聚态物质、资源、环境、新物质创造与转化、脑科学与认知、科学实验与观测方法等为物理化学的发展提供必然的机遇和广阔的空间。以知识为基础的社会对科学发展提出了强烈需求，综合国力的竞争已前移到基础研究。我国作为快速发展中的国家，更要强调基础研究服务于国家目标，物理化学应该在人类健康、农业、地球系统、能源、材料等国家重大需求方面有更大的作为。显然基础研究如何面向国家重大需求为物理化学的发展提出了严峻的挑战。

物理化学在当代科技发展的中应该大有作为、前程光明。以本人之浅见，物理化学的发展之所以出现“瓶颈”的若干重要原因在于：（1）广泛深度的学科交叉融合还不够积极主动；（2）面向国家目标、密切联系科学前沿还不够旗帜鲜明；（3）基础与应用的关系，科学与技术的统一认识还存在差距。

胶体与界面化学发展的几点思考

—兼谈分子聚集与组装

刘鸣华

(中国科学院化学研究所 北京 100080)

胶体与界面化学是物理化学的一个重要分支,是研究微观不均相体系以及界面现象的科学。凡是在固、液、气相中含有固、液、气微粒(1 到 1000nm)的体系均属于胶体科学研究的范围;由于这些体系具有巨大的界面,离开界面的研究就无法理解胶体的各种现象,因而这门科学又经常被称为胶体与界面科学。

自从这门学科诞生以来,经历了曲折的发展,有很多现象,事实上很早就在本领域中有研究,但是失去了很多机会,被一些新兴的学科所替代。但是,由于该学科与国民经济、日常生活以及工农业生产有太多的联系,同时与新的学科与热点研究领域,如纳米科技,超分子科学,生命科学、材料科学密切相关,此外在现代能源、信息、生物和环保等的重大领域中,也有许多胶体与界面科学的问题,本学科表现出了顽强的生命力。本研讨拟就该领域的未来一些发展方向,以及一些重要的问题如分子间相互作用,分子的聚集,有序结构,分子组装以及本领域的挑战性科学问题提出一些看法。

加强国家自然科学基金对物理化学研究队伍建设的作用

刘世林

(中国科技大学化学物理系 合肥 230026)

在国家自然科学基金持续稳定的支持下,我国物理化学领域的研究工作获得了长足的发展,许多工作确实达到了国际领先水平,由此带动了研究水平的整体提高,同时也培养了一批优秀学生,为学科发展提供了后备力量。

相对于化学的其它二级学科,物理化学是基础性较强的学科,目前与实际应用的联系程度还比较弱。此外,由于是交叉学科,要求研究生必须具备一定的物理和化学知识。在研究生报考时物理化学是相对“冷门”的专业,我认为是上述两方面的原因造成,学生既担心学习物理化学有难度,又担心将来就业问题。这关系到物理化学的招生质量问题,也直接影响到学科的研究水平和深入发展。

即将面临的另一个挑战是研究生教育改革问题。似乎实行收费改革是大势所趋,我国十所高校将试点研究生收费改革,其中最敏感的环节是导师资助制,即导师拿出部分课题经费支付研究生生活费用。对绝大多数高校物理化学专业教师来说,国家自然科学基金项目是最重要和唯一的经费来源。目前面上项目的劳务费最多为资助经费的15%,支付研究生生活费用肯定有困难,而如果自费,将导致研究生报考人数进一步降低。所以,建议适当提高国家自然科学基金(尤其是物理化学项目)的劳务费,及早应对高校研究生收费改革,保障研究队伍的稳定发展。

小尺度反应、尺度效应与单分子检测

刘忠范

(北京大学化学与分子工程学院物理化学研究所
北京大学纳米科学与技术研究中心 北京 100871)

传统化学的研究对象通常包含着天文数字的原子或分子。例如，100 毫升的烧杯中装满 1 摩尔浓度的硫酸铜水溶液，其中铜离子的个数达 6.023×10^{22} 个。因此，传统体系的各种物理化学性质都是大量粒子的统计平均行为，这也是热力学定律成立的前提条件。那么，当研究的对象变成纳米尺度的物质、纳米尺度的微观世界，变成一个原子或一个分子时，是否还会遵循我们从课本上学到的传统理论和规律呢？而且，如何检测、如何评价这种纳米体系的化学性质呢？这是化学，尤其是物理化学遇到的新问题。

纳米科技的发展已经使得人们有可能实验研究有限粒子体系，乃至单分子体系的化学反应性质。例如，我们利用 STM 隧道电流诱导电荷转移复合物单晶表面发生纳米尺度的分解反应，通过针尖的设计和隧穿条件的控制，反应分子数可以控制在十几个左右。直径 1nm 左右的单壁碳纳米管也是一个非常有趣的研究对象。把单根碳纳米管作为电极，进行电化学沉积时，电化学反应行为似乎与碳纳米管的手性密切相关，有可能成为手性检测的一个简单方法。迄今为止，人们对纳米材料的尺寸效应已经做了大量的研究工作。当体系中仅含有有限个反应粒子时，是否也存在“临界尺寸”——在此之上遵循传统反应规律，而在此之下则遵循另外的规律，乃是一个非常有趣的研究课题，值得深入探讨。

从我国燃料电池发展看基础研究的重要性

陆天虹

(南京师范大学化学与环境科学学院, 南京 210097)

由于国外对地面用燃料电池的研究要比我国早近二十年时间, 因此, 当我国在“九五”计划期间开始资助燃料电池研究时, 国外已经有了各种燃料电池的样机等, 因此, 在我国一开始就强调燃料电池样机的研制, 而没有重视基础研究。

在十多年中, 有关燃料电池基础研究的重点项目只有2个, 一是国家自然科学基金委的“直接醇类燃料电池”项目, 研究经费150万元, 另一个是科技部“973”项目“氢能的规模制备、储运及相关燃料电池的基础研究”, 用于燃料电池研究的在800万元左右。而对应用研究的资助早已接近2亿元。

近年来, 电动车用的质子交换膜燃料电池 (PEMFC) 更是受到重视, 国际上, 许多国家政府和不少汽车公司都大量投资用于 PEMFC 的研发, 并研制了各种 PEMFC 电动车样车, 并宣传即将要产业化。今年上半年, 上海汽车公司组织我们对我国研究车用 PEMFC 的单位进行了考察, 发现 PEMFC 商业化还要解决许多问题。1. 价格问题 2. 氢源问题, 3. 低温工作问题, 4. 贵金属资源问题, 5. 寿命问题, 6. 二氧化硫问题

但是, 科技部和一些专家认为, 燃料电池研究已经处在应用性的阶段, 已经没有多大基础问题了, 因此在近几年的“973”项目指南中都没有燃料电池方面的项目。

从上述 PEMFC 存在的问题来看, PEMFC 的商业化还是一个长远的目标, 因此, 我们要向有关部门积极反映有关情况, 要重视燃料电池的基础研究, 从本质上加快燃料电池商业化的进程。

从我们国家自然科学基金委物理化学学科来说, 我们的重点基金项目应每隔几年, 组织有关专家讨论和确定后几年中的重点项目, 特别要配合国家重大和重点项目及我们学科的一些关键基础研究领域来立项, 要改变由大家自由建议和申请的方式, 使我们重点项目有更好的成效。

胶体化学在无机微纳结构形貌控制合成方面面临的机遇和挑战

齐利民

(北京大学化学与分子工程学院, 北京 100871)

由于无机微米或纳米结构材料的各项性能在很大程度上直接受到其外观形貌与内部构造的影响, 因而具有特定形貌与构造的新型无机微纳结构(如一维纳米结构、中空笼状结构及高级有序结构)的可控合成近年来受到人们的普遍关注。基于溶液体系的胶体化学合成方法因其在合成条件温和、调控手段多、适用物质种类范围广等方面的独特优点而显示出良好的发展前景。因此, 关于形貌与构造可控的无机微纳结构的溶液合成方面的研究为当代胶体化学的发展提供了新的机遇。目前, 常用的胶体化学合成策略主要包括: (1) 表面活性剂分子及功能性有机(大)分子的表面包覆作用和诱导作用, (2) 有序分子聚集体的软模板作用, (3) 某些特定固体结构(含牺牲性前体模板)的硬模板作用, (4) 合成体系中粒子生长动力学的调控, (5) 溶液中胶体粒子的受控自组装等。与此同时, 该领域目前也面临着一些具有挑战性的难题, 主要包括: (1) 简单易行、环境友好、普适性强的溶液合成新方法与新原理的探索, (2) 各种胶体合成方法中实现形貌控制的作用机理研究以及相关理论的建立, (3) 材料形貌和构造与其各项性能之间的相互关系研究, (4) 具有特定实用价值的功能性微纳结构材料或器件的制备与应用研究。

理论化学：机遇和挑战

邵久书

(北京师范大学化学系 北京 100875)

量子力学为化学奠定了牢固的微观基础。目前，严格的量子力学方法不仅能够阐明许多来源于直觉的重要概念和观念如化学键等的本质，而且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进行准确的计算。然而，随着体系尺度的加大，应用准确量子力学方法所遇到的计算困难呈指数增大，从而大大限制了对多原子分子系统的理论研究。另一方面，增大分子体系的尺度导致系统复杂程度的增加，甚至对系统本身性质的描述都不直截了当。因此，理论化学除了从微观方面继续发展有效的方法和计算技术揭示多原子分子体系的基本物理化学性质外，还应该关注复杂系统处于非平衡状态的统计行为，进而对阐明物质在较高层次上所展示的各种性质如自组织、生命现象等机理方面有所作为。

分子与高分子功能材料器件的理论化学研究前沿

帅志刚

(中国科学院化学研究所, 北京 100080)

理论化学在近几十年取得的重大进展, 其重要特征就是理论化学的成果已经转化为各种计算化学软件, 在化学的各个学科以及生命科学、材料科学、信息科学等前沿交叉领域已经得到广泛应用。但是, 理论化学的发展仍然存在重要挑战, 无论是在电子大体系电子结构, 还是在化学反应动力学包括凝聚相与复杂体系, 理论研究还只是处于初级阶段。实际上, 大多数实际体系都牵涉到这些前沿理论问题。分子与高分子功能材料与器件是近年来得到迅速发展的前沿交叉学科, 具有重要应用前景, 如有机发光已经进入产业化, 无论是作为信息显示或者是固体照明, 都处于大规模商业化的前夜; 有机太阳能电池的能量转换效率正逐步提高, 接近工业化水平; 有机薄膜晶体管将在显示驱动电路和打印线路等领域得到重要应用; 有机光子学正被广泛地试用于信息存贮、光动力学治疗、微纳技术加工、生物检测等。这里的基本科学问题都需要从理论化学的研究得到解决, 即分子与高分子的电子结构、载流子传输与复合、激发态的形成与衰变、能量与信息载体的传递。因此, 迫切需要理论化学在大体系的电子结构与激发态以及凝聚相的电子与能量过程研究中取得突破。

分子以上层次的一些结构化学问题

——结构化学发展与机遇

苏成勇

(中山大学化学与化学工程学院 广州 510275)

按照经典定义,结构化学是研究原子、分子和晶体的微观结构,研究原子和分子运动规律,研究物质的结构和性能关系的科学。在自然科学中,探明物质的结构是理论研究的基础。然而,随着化学研究外延的不断扩展,目前的研究对象已经扩展到大分子、超分子,需要研究分子间的作用于关系,结构化学的研究内容也随着化学科学研究对象的扩充而改变。徐光宪教授总结当今化学发展的趋势,提出化学的新定义: *化学是主要研究从原子、分子片、分子、超分子,到分子和原子的各种不同尺度和不同复杂程度的聚集态和组装态的合成和反应,分离和分析,结构和形态,物理性能和生物活性及其规律和应用的自然科学*。因此,结构化学的研究层面,也需要在原子的基础上,相应扩展到分子、分子片、超分子以及介观聚集态、宏观聚集态和复杂高级结构的水平。

但是,与传统结构化学相比,超分子结构化学的研究远远落后于新分子的合成,许多现象有待进一步解释、归纳、总结,许多技术手段跟不上合成化学的发展,许多结构与性能的关系问题和超分子结构化学对超分子合成的指导性需要进一步加强、完善,一下是一些需要关注的结构化学问题:

- 1、分子和分子间非共价相互作用的本质、规律及其对分子聚集体的影响。
- 2、结构复杂性和多样性的认识及其与功能的关系
- 3、超分子理论化学、数据分析及结构信息与规律的总结

立足基础、瞄准方向、持之以恒

——关于物理化学学科如何开展系统性、原创性研究工作的体会

孙世刚

(固体表面物理化学国家重点实验室, 化学化工学院化学系, 厦门大学,
厦门 361005)

本文结合原子排列结构层次表面电化学与电催化研究的实践和发展历程, 探讨如何立足基础、瞄准方向并持之以恒地开展系统性、原创性的科学研究工作。

在原子排列结构层次认识表面化学和物理过程是多学科交叉的前沿课题, 涉及表面化学、表面物理、表面结晶学、超高真空技术科学、电子能谱、原位光学光谱、扫描探针显微术、电化学和催化科学等众多领域。在固/液界面开展表面原子排列结构明确的电化学研究始于 20 世纪 70 年代末, 虽然从一开始人们就认识到在原子排列结构层次研究表面化学和物理过程对于发展相关基础理论、指导实际应用具有十分重要的科学意义和应用价值, 但在 20 世纪 80 年代发展并不迅速。可归纳为在 20 世纪 80 年代基本知识积累、1990 年以后研究活动陡然增加和 1995 年开始的持续线性增长三个阶段。借助纳米科技实现表面原子排列结构层次的基础研究与能源转换(燃料电池, 氢能源)、新物质合成(电合成)、生命和环境(电化学传感)等重大领域中电催化实际问题的结合与解决, 是推动研究持续线性增长的驱动力。人们在研究纳米材料的尺寸效应及其他特殊效应带来的新奇的化学和物理性能和各种应用的同时, 开始关注纳米材料的表面结构及其效应。从而使得在运用单晶电极开展的模型电催化研究中获取的规律, 被应用在微观层次设计、研制和筛选高性能电催化剂。

不难发现国际上能够从 20 世纪 80 年代至今一直坚持开展原子排列结构层次表面电化学与电催化研究的小组为数不多。许多研究小组都是在某一个时间段运用单晶电极开展研究, 然后将兴趣转到了其它方向, 一些研究者则是“偶然”涉猎了单晶电极的研究。当然, 还有更多的研究团队(特别是年轻博士)正在从事或被卷入单晶电极的研究。而长期坚持研究的代表性团队都在各具特色的研究方向上都取得了丰硕的成果, 对物理化学及相关学科的发展做出了重要贡献。我们研究小组从 20 世纪 80 年代末至今得到了国家自然科学基金委、教育部和其他方面的持续支持和资助, 从而得以自行建立金属单晶电极研制技术和设备, 在铂族金属单晶电极表面吸、脱附和修饰过程, 有机燃料小分子反应的表面过程和动力学、氨基酸分子与单晶电极表面相互作用, 电催化表面结构效应, 分子水平上的电催化反应机理, 以及电催化剂纳米粒子表面结构控制合成等方面取得了一系列原创性科研成果。

关于物理化学发展的瓶颈问题的思考

孙予罕

(中科院山西煤炭化学研究所, 太原 030001)

在 21 世纪之初, 化学热力学注重于生物热力学和热化学研究, 如细胞生长过程的热化学研究、蛋白质的定点切割反应热力学研究、生物膜分子的热力学研究等; 同时, 非线性和非平衡态的化学热力学与化学统计学研究, 分子-分子体系的热化学研究(包括分子力场、分子与分子的相互作用)等也是重要方向。化学动力学将会有新的发展, 如利用分子束技术与激光相结构研究态-态反应动力学, 用立体化学动力学研究反应过程中反应物分子的大小、形状和空间取向对反应活性以及速率的影响, 以及用飞秒激光研究化学反应和控制化学反应过程等。生物大分子、纳米构建和表面结构的研究正在推动结构化学的快速发展, 尤其是动态结构的研究, 如核磁共振谱法研究大分子在溶液中的动态结构(R. Ernst, 1991 年诺贝尔化学奖), STM 或 AFM 以及其它谱学方法研究催化表面的结构以及催化过程等等。经过 20 世纪量子力学和化学相结合, 量子化学已经发展成为化学以及有关的其它学科在解释和预测分子结构和化学行为的通用手段, 并曾经将化学带入一个新时代, 根据量子化学计算可以进行分子的合理设计, 如药物设计、材料设计、物性预测等。但是目前尚未形成研究分子层次的统一理论, 对许多化学现象和问题还不能用统一的理论来归纳、理解和认识。如分子的平衡性质和非平衡态, 反应的过渡态和反应途径, 分子-分子体系的相互作用等, 都有待于从化学实验结果提高到理性认识。

近 20 年来, 我国的物理化学领域进展紧跟国际前沿, 发展迅速, 但也存在一些发展瓶颈问题。物理化学是理论性很强的学科, 在由此产生的应用研究服务于国民经济的同时, 其固有的特点应得到进一步的凸现, 否则滞后的理论和方法研究难以产生原创性的理论和应用成果, 其结果将是我国物理化学研究继续处于追踪国际热点而无多少独创的研究。因此, 建议联合物理学家, 大力支持以下方向研究:

(1) 单分子化学物理, 强调单个化学键的选控和选键化学, 发展检测单分子化学物理性质的实验方法和技术, 以及单分子层次上的化学反应本质和选控、新型单分子制备以及分子器件的构建等未来单分子科学的发展方向。

(2) 研究方法和原位技术, 研究表面和界面化学现象的物理研究方法和原位表征技术, 结合纳米催化和纳米反应器的空间效应, 发展立体反应动力学和分子反应动力学理论。

(3) 生物现象和凝聚态的物理化学, 尤其是化学热力学和结构化学的研究。

(4) 开展重原子族和大分子的电子结构理论方法, 以及分子动态学的理论方法及复杂化学体系的理论模拟等方面研究。

综上所述, 物理化学的发展, 一是突破, 二是融合。突破是指探索新的科学规律和科技成果, 而融合是指学科交叉、共同解决各种科学问题, 形成边缘学科。上面提到的各种重大成果, 都是多学科共同研究的结果。

物理化学学科现状和电化学研究难点之管见

田中群

(固体表面物理化学国家重点实验室, 化学化工学院化学系,
厦门大学, 厦门 361005)

相比上世纪八十年代, 我国物理化学在科研学术界的作用和影响可能有较明显下降。原因可能有多方面: 例如:

1. 发展新研究方法(包括实验和理论二方面)的难度大, 往往需要 5 年或更多年的时间, 在目前急功近利的氛围中难以顺利开展。
2. 数理功底深厚的老一辈科学家大部分已离开科研第一线, 年轻一代似乎比较忽略物理领域的新进展和新技术, 更注重化学领域中发展较好的合成方面工作。
3. 由于科研条件和经费的明显改善以及合作便利, 化学的各个分支学科的研究者们也有条件直接使用各类仪器, 甚至有发展物化方法。
4. 物理学家积极介入化学甚至跨跃化学直接进入生命领域, 并与化学家和生物学家合作, 在引进新研究方法和理论方法发挥关键作用。
5. 物化工作者参与物理学界的学术会议和活动远远少于物理工作者参与化学会议。随着大科学格局的形成和能源、生命、材料、信息等大领域的项目引领, 物理化学目前的格局和重点是否合理? 或正在被边缘化? 或正在与其他学科融合? 如何发展?

电化学作为具有 200 年以上历史的老学科, 在能源和生命领域里仍可发挥重要作用。从基础研究而言, 长期存在阻碍其发展的难点和瓶颈问题。例如:

1. 迄今尚未有可以在 1 纳米尺度的范围详细研究电化学双电层的实验方法和描述各类电化学或固体-液体界面体系的双电层模型和理论
2. 与发展燃料电池等密切相关的固/液/气三相界面体系的原位表征和传荷及传质过程的模型和理论。
3. 电解质溶液体系中无数的离子-离子、离子-溶剂分子的相互作用的精确计算和理论模型尚无法实现。
4. 具有尺寸效应的纳米液体和纳米固体的物理(电学和光学)性质如何显著影响电化学性质
5. 另外, 物理化学似乎需要重视发展研究复杂体系弱相互作用、体相内部的局域反应和表征、适用于极端反应条件的实验和理论方法。

以上不成熟的想法仅为抛砖引玉, 请大家批评指正。

重视多相催化反应过程的分子基础研究

万惠霖

(固体表面物理化学国家重点实验室, 厦门大学化学系 厦门
361005)

工业上采用的和研究、开发中的催化反应过程绝大部分是多相催化过程。在分子水平上研究得比较透彻的大多是象配位催化这样的均相催化过程。这些年来, 随着以谱学技术为代表的实验方法和以量子化学为代表的理论方法的发展以及相邻学科的促进, 多相催化的研究和开发有了长足的进步, 但颇有深度的研究还不是很多。一些经典的催化反应过程, 如工业合成氨过程, 已有近百年的开发、研究历史, 虽然国内、外的催化贤达对其所用熔铁催化剂 (α -Fe) 暴露晶面的活性中心结构 (C_7 位)、催化作用机理 (多核活化 $N \equiv N$ 键) 和反应机理 (解离式或缔合式), 先后提出了一些很有见地的看法, 但因条件有限, 尚在确证之中。鉴于分子催化研究对提升催化研究水平和更好地适应社会经济发展的需求极为重要, 我们建议:

切实重视多相催化反应过程的分子基础研究, 包括如上所述的催化剂活性中心结构, 活性物种, 催化 (剂) 作用机理和催化反应机理的研究;

应用和大力发展原位 (实态), 特别是动态 (实时) 表征方法, 包括发展短寿命、低浓度反应中间体直接观测的仪器设备和技术, 目前似可考虑采用某些间接方法 (如化学捕获和基质隔离方法);

应用以量子化学为主的理论方法, 在原子、分子水平上认知催化剂结构和催化作用机理, 比较和关联不同催化剂体系中特定化学键活化的模式和选择性的控制因素, 为高性能催化剂的设计和研制提供科学依据; 更精确模拟和分析有关谱学表征技术所得到的化学图象, 实现理论、模拟和实验的结合。

当前物理化学发展中的几个前沿问题举例

万立骏

(中国科学院化学研究所 北京 100080)

以“物理化学发展的瓶颈与思路”为题进行研讨,对学科发展非常及时也非常必要。近几年,物理化学发展迅速,不仅在化学研究,就是在物理、生命、材料等其它科学的发展中也发挥着不可替代的作用,显示了该学科的重要性。同时,该学科与其它学科交叉特点明显,涉及诸多跨学科的前沿科学问题,是挑战,也是机遇。以下只是本人想到的,目前物理化学学科发展中几个领域中的前沿问题举例:

1. 在分子科学研究和纳米科学研究中的课题

- (1) 单分子以及纳米尺度物质的性质测量,新现象的发现,以及相关技术和仪器研制。
- (2) 分子纳米结构的可控构筑与结构调控,分子间相互作用的理解和应用。
- (3) 自组装组织的极限尺寸、大面积组装,以及利用组装组织实现器件的可能性。
- (4) 微、纳米结构的结合,即 Top-Down and Bottom-Up 的结合。
- (5) 表面物种的识别,表面结构与性质的关系。

2. 新材料的发现和现有材料性能的充分发挥。例如电极材料及其性能研究。

3. 相关理论的发展、应用和对学科发展的引领作用。

另外,物理化学的发展,应积极重视新仪器的研发和新技术的利用。注意结合如能源,环境以及人口健康等全球性社会发展问题开展研究,这样将会发挥物理化学的更大作用,也会促进学科自身的更大、更快发展。

物理化学发展趋势的若干思考

王 琛

(国家纳米科学中心 北京 100080)

物理化学在推动交叉学科(如生物技术、新材料技术、能源技术等)的发展方面发挥了非常重要的作用。以纳米科技的发展为例,物理化学研究的发展对于实现以原子、分子为起点制备出具有特殊功能的纳米器件这一重要目标无疑是至关重要的。

近年来对纳米材料和结构制备的深入研究揭示了许多有重要应用前景的物理和化学性质。值得一提的是,近年来显微技术的发展如单分子检测方法的迅速发展为这方面的研究活动提供了重要技术基础,为这一研究方向注入了新的活力,极大地提高了对单分子水平上对材料结构和功能的实验研究能力,形成了以化学性质识别为特色的显微方法,研究内容不仅局限于获取材料表面的结构和形貌特征,更加重要的是在单个分子的水平上上将结构与性质地联系起来。今后的研究重点建议考虑针对化学和生物分子的定性识别和定量分析发展新型、高效的纳米尺度传感器件,特别是对发展新型原理器件、环境分析、疾病早期诊断和治疗有重要意义的体系。与此密切结合的研究内容包括材料的表面物理化学过程;纳米尺度内物理、化学性质的检测和表征、相关基本理论研究;分子纳米结构和单分子检测;利用原子、分子间的相互作用,以多个组分的复合分子组装结构为构筑单元制备具有特定形状和特殊功能的纳米器件,发现相关的新效应。此方面的工作将有助于推动学科交叉和合作研究,以及在纳米科学与技术的关键研究领域开展原创性基础研究。

物理化学的发展与社会

——物理化学发展的人才和资源瓶颈

王鸿飞

(中国科学院化学研究所 北京 100080)

物理化学的生命力在于它不是一个具有确定对象的学科，而是注重研究的思想和方法，为不同学科研究和技术发展提供基础知识和技术，为社会教育和高技术发展训练具有综合能力的人才。过去半个多世纪，军事工业、微电子工业和生命医学产业的发展和技术手段的变迁不断地改变着物理化学研究的内容，以及人才训练方式。如果不能继续为相关学科提供新的思想和方法，整个物理化学学科会面临逐渐消解的命运，淹没在过去的巨大成功之中。中国物理化学研究更为缺乏原创性，缺少对相关学科和技术的推动和引领作用，作为一个学科的状况尤其不乐观。

学科发展的推动力，在于社会中各方面对相关知识和技术的需要，还在于能够不断吸引、培养和训练创造性的人才。我国物理化学发展的瓶颈正是在于缺少真正具有创新研究能力、经过系统研究训练和具有国际竞争能力的人才。在大量的研究和学术资源被平庸研究耗尽的情况下，物理化学学科的发展面临着进一步的危机。

在研究内容和研究手段不断变化的情况下，给什么样的人以引领研究的机会，在什么阶段为什么样的人才准备什么样的进入和退出机制，是保证物理化学学科研究活力的关键。这是基金组织、研究机构、大学和研究人員需要时常思考和解决的问题。

融合仿生、均相、多相催化领域的研究，寻找实现挑战性催化反应突破的思路

王 野

(固体表面物理化学国家重点实验室 厦门大学化学化工学院
厦门 361005)

作为物理化学的分支学科之一，催化是一门面向重大能源、资源和环境问题、有极其重要应用背景和前景的学科。许多新催化反应过程的建立有力地推动了社会的进步，同时也促进了学科自身的发展。催化领域存在一些公认的十分重要但难度极高的挑战性化学反应，如甲烷等低碳烷烃的选择氧化和氧化脱氢、丙烯环氧化、苯选择氧化制苯酚、过氧化氢的直接合成等。在社会对能源和资源的有效利用及对环保的要求愈来愈高的今天，有关这些反应的研究显得格外重要。这些反应大多蕴含着如何通过设计和研制高效催化体系和催化剂以实现化学反应选择性的调控这一最基本的科学问题。针对相关的反应，迄今在多相、均相和仿生催化等各领域已开展了一定的研究。为应对来自社会和学科发展的更高的要求，有必要融合仿生、均相和多相催化各领域积累的研究成果和思路，并充分利用其它相关领域如金属有机化学、合成化学、表面化学、理论化学等领域的成就，形成可能实现相关挑战性催化反应突破的基本研究思路。

一些可能的研究思路包括：模拟酶催化体系的活性位结构和功能，创制环境友好的高效均相催化体系；利用多核金属配合物、多金属氧酸盐（杂多酸等）等多核金属体系可能的多电子转移、质子转移的特色模拟酶体系中电子和质子传递，组合和设计高性能催化剂；利用均相体系中通过选择配体以调控中心金属的活性和选择性的基本思想，设计和研制具有“单中心”活性位或拥有特定配位结构和周边微环境活性位的多相催化剂。

发展金属纳米簇基催化剂面临的挑战

王 远

(北京大学化学与分子工程学院, 北京 100871)

催化是物理化学的重要分支, 金属催化剂在能源利用与开发、环境保护、精细化工以及国防建设等许多领域具有重要作用。金属纳米簇化学的研究进展给催化剂的设计、合成及性能研究带来了新的机遇。以金属纳米簇为基元的催化剂构筑方法有别于传统的金属离子吸附、还原制备途径, 具有很高的结构可控性。将预先制备的金属及双金属纳米簇俘获于载体表面, 或使之与其它纳米粒子复合, 可以有效地调控金属催化剂的粒径、组成、金属含量等关键因素, 进而实现对催化性能的优化。发展金属纳米簇基催化剂面临的挑战性课题包括: 1) 建立高效制备催化性能优良的金属及合金纳米簇的合成方法, 控制金属粒子尺寸、组成、结构、形貌及周边环境等因素; 2) 发展金属纳米簇复相化技术, 利用载体与金属相互作用调控催化性能, 发展高金属载量的金属纳米簇基催化剂; 3) 区分尺寸效应、配体修饰效应及载体效应; 4) 发展新型实用催化体系。

- [1] Y. Wang and Y. Wei, "Metal Nanoclusters" in "Metal Nano-clusters" (Chapter) in **"Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology"** Vol. 5, 337, 2004 (American Scientific Publishers, California USA)
- [2] Y. Wang, J. Ren, K. Deng, L. Gui, Y. Tang, **Chem. Mater.**, 2000, 12, 1622.
- [3] B. Zuo Y. Wang, Q. Wang, et al., **J. Catal.**, 2004, 222, 493
- [4] J. Zhang, Y. Wang, H. Ji, Y. Wei, and N. Wu, **J. Catal.**, 2005, 229, 114.

“眼中有科学，胸中无学科”：对物理化学学科的发展战略的一点思考

翁羽翔

(中国科学院物理研究所 北京 100080)

自然科学经过几个世纪分门别类的研究，早已自成体系，各立门户。随着各自领域的扩张，学科间的交流和渗透日益密切，学科间的界限也日益变得模糊。电脑程序化的出现，使得优先发展的学科得到普遍的应用和广泛普及，作为学科的界限变得更加难以界定，最后该学科的特点和专家的数量也锐减，大量的实际应用将由非专门训练的从业人员和计算机共同完成。在这些优先发展的领域中，数学就是一个典型的例子。另一个使学科走向衰弱的趋势是大众的需求和功利。正如生活中猫和老鼠的关系，如果捕尽了老鼠，作为捕老鼠的猫将失去存在的理由。猫的功能必须转换成宠物的角色。当今的物理化学，如果定义成一只有捕老鼠的猫，那末必须向公众证明老鼠在那里。如果不能够解决公众的切身利益，那么，物理化学，当然还有其他学科会发生角色转换，其存在的理由是因为人类的知识和精神财富，我们的后代必须继承。作为前一个功能，物理化学应该进一步拓展领域；而作为后一种功能，物理化学的承传领地更多的是在高校。鉴于这样的一种形势判断，我的主张是“眼中有科学，胸中无学科”，打破学科的固有局限。因此基金委政策和经费应该更多地导向科学问题，发展解决问题的基本手段，并由此实现学科内容的不断更新，直接或间接的提高生产力。

小尺度表面的物理化学研究

吴 凯

(北京大学化学与分子工程学院 北京 100871)

给定固体结构中，表面原子在总原子数中所占的比例称之为分散度 (dispersion)。利用自上而下的方法来降低宏观材料尺度的过程，实际上是表面原子增多的过程，也就是分散度增加的过程。普通固体材料的性质，往往只能体现出体相性质，表面性质往往被体相性质所掩盖而难以彰显出来。随着固体材料尺寸的降低，表面性质会逐渐彰显出来。如何检测、抽取和利用表面特性是一个十分复杂的问题。

随着表面科学的发展和纳米科技的研究深入，探讨小尺度表面的性质变得日益重要和复杂。但是，这些表面性质的研究却对许多领域有着重要的影响，如催化、电化学、半导体、光学、力学、表面增强谱学和环境等等。

传统上，人们利用单晶材料来研究表面性质，然后将它们与宏观性质关联起来。其缺陷是，单纯从表面科学研究获得的信息未必能够直接被利用或移植来解释普通非规整宏观固体材料的性质，存在所谓的结构鸿沟和压力鸿沟问题。究其原因，是因为小尺度的表面结构控制非常困难，小尺度样品的表面清洁处理十分棘手，小尺度表面的检测很难实现。

如今，各种小尺度材料的制备方法不断涌现，已合成的纳米晶体材料成千上万，这为人们制备和获取小尺度表面材料提供了十分便利的条件。表面科学的发展，特别是扫描探针显微技术的发展，使得人们可以直接检测微米和亚微米表面的物理化学性质。将两者结合起来，就有可能直接研究小尺度表面的表面结构和反应性能。

超分子光化学

吴骊珠，佟振合

(中国科学院理化技术研究所，北京 100080)

以多种分子间相互作用为基础，以超分子和分子聚集体为研究对象的化学称为超分子化学，它与生命科学、材料科学、分子电子学等学科交叉融合形成的超分子科学被认为是本世纪新概念和高技术的一个重要源头。超分子光化学是超分子化学的重要组成部分，它所建立的新概念、新理论和新方法，大大开拓了人们对物质认识的深度和广度，对了解自然界的光合作用和生命过程、开发新的材料提供了重要的基础。

近年来，随着高新技术的发展，特别是光电功能材料的发展为超分子光化学的研究提供了广阔的空间，因为几乎所有光电子功能材料都不可避免地涉及光诱导电子转移、能量传递和电荷分离过程。人们开始利用多年来光化学领域的研究积累来研究光电功能材料中的一系列问题，这些问题的解决将为理解光电子材料的工作原理和研制新型的光电子材料提供依据。

另一方面，超分子体系中光化学过程的研究为发展有应用价值的新反应、新工艺提供了可能，与热化学反应相比，光化学反应具有可控性强、选择性高、反应条件温和等特点，利用超分子体系所提供的纳微米结构为微反应器控制光化学反应的方向、提高反应的选择性，发展高选择性、高活性、催化剂和微反应器易回收重复利用的体系具有重要的科学意义和应用价值。

理论与计算化学发展的思考

吴 玮

(固体表面物理化学国家重点实验室，化学化工学院化学系，
厦门大学，厦门 361005)

从学科交叉的角度，计算化学与计算机科学同时诞生于上个世纪 40 年代，可以认为是计算科学的一个子学科，与计算物理与生物物理，计算生物，和计算工程等学科具有紧密的交叉。在过去的 20 多年来，随着计算机科学与技术的飞速发展，新的计算方法与算法层出不穷，各种计算程序包的不断丰富，计算化学已成为化学学科中发展最快的分学科之一。虽然当今计算化学发展具有相当好的机遇，计算成本越来越低，可应用计算的体系越来越复杂，然而计算化学的发展仍然面对诸多挑战，有一些问题也许值得我们去思考：

计算化学为实验化学提供的帮助仍然十分有限，目前实验化学家仍然不需要计算化学。如何使计算化学成为化学学科中不可缺少的学科？如何为实验化学家对实验的设计提供有益的信息？

当前各种计算化学软件包功能越来越强，计算界面越来越友好。实验化学家已经可以独自开展与自己实验相关的理论计算。理论化学家如何继续发挥和保留自己的优势？

学科的交叉使学科间的界限日益模糊，如何在计算生物物理，材料设计，和药物设计这些交叉学科中保留计算化学学科的特点和优势？

结构化学的一些发展趋势

吴新涛

(中国科学院福建物质结构研究所 福州 350002)

(提 纲)

- 一、 通过组装与自组装合成系列化合物并总结结构化学规律。
- 二、 原子团簇的结构调控与性能研究。
- 三、 结构敏感功能材料——光、电、磁、吸附、催化、仿生等新性能材料的探索。
- 四、 用水热或溶剂热法探索新型有机化学反应或新型金属配位化合物。
- 五、 手性化合物的组装与自组装。

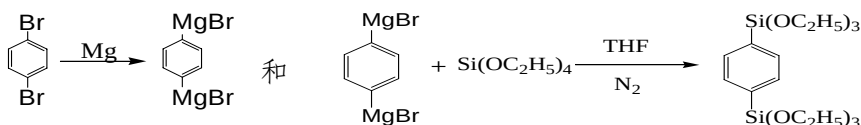
学科融合对物理化学领域催化化学发展的促进

夏清华

(有机功能分子合成与应用教育部重点实验室 & 湖北大学
化学化工学院 武汉 430062)

传统上, 化学学科包括无机化学、有机化学、分析化学、物理化学及高分子化学和物理等基础学科。催化化学被划分成匀相催化和多相催化; 而匀相(络合)催化归属于有机化学领域, 多相催化则多归属于物理化学(或化工)领域。这种条块分割的结果, 造成了各学科之间严重的壁垒、所教授的知识和技能甚至研究的方式与方法都存有很大的差别, 很容易造成研究工作中思维的局限性。谈到学科交叉融合的重要性, 没有人会表示异议, 也是目前世界科技发展的大趋势。很多重要成果, 甚至 Nobel 奖的产生都是来源于学科交叉融合的结果。

下面举几个与本学科有关的例子加以佐证。例如, Ingaki 创制并在 Nature 上报告的硅-苯基 PMO 杂化材料, 与其它中孔分子筛相比简单到仅仅改换了一个有机硅源(1,4-二(三乙氧基)硅基苯), 然而不可否认这是中孔材料领域的重要发展, 该类材料在催化上有很多用途。原料制备由两步有机合成完成, 反应在无水和氮气保护下进行, 最后再减压蒸馏。



另一个典型例子是手性催化合成, 包括手性环氧化、氢化等反应, 要获得高的 ee 值, 手性配体的合成与固载化必需有机化学的知识和技能。再如苯乙烯与空气的催化环氧化(无有机还原剂), 可以被 Co 离子交换的 Co-X、Co-MCM-41、Co-ZSM-5、Co-A 等催化剂引发, 但转化率约 60%、选择性低于 70%。当使用香草醛水杨酰脲配位的 Co-ZSM-5 复合催化剂时, 转化率达 96%、选择性达 94%。该反应为游离基历程, 与担体孔径关系不大。MTO 流化床过程的成功工业化, 也是催化化学与无机合成(催化剂)、反应器工程、化工工艺等交叉融合的成功例子。

分子筛催化材料研究的某些特点、趋势和局限性

肖丰收

(吉林大学化学学院, 长春 130012)

自从分子筛材料诞生之起, 就作为最有效的催化剂之一, 广泛和大量地应用于石油炼制和化工领域中, 并获得了可观的经济效应, 这反过来又更好地促进了分子筛催化材料的进一步发展。回顾历史, 分子筛催化材料研究具有如下明显的特点: (1) 分子筛材料得到了广泛的商业应用; (2) 分子筛材料与催化工业的联系非常紧密, 从分子筛材料的发现 (数克样品) 到工业应用 (吨规模以上) 涉及到大量的人力、物力, 也涉及到许多学科的交叉和融合等等; (3) 世界著名石油公司的研发中心是推动分子筛发展的最主要力量之一, 例如 ZSM-5 沸石和介孔材料 MCM-41 都是首先由 Mobil 公司发现, 磷酸铝分子筛材料首先由 UOP 公司发现。

但是, 对于我国目前分子筛催化材料研究中, 仍然有一定的局限性。首先, 与国际先进水平相比, 我国的大公司、大企业的分子筛研发中心仍然相对较弱。其次, 我国的分子筛的基础研究与工业界的结合相对较弱, 这大大限制了由我国所合成分子筛材料的工业催化应用。因此, 加强工业界与基础研究的联系, 进行基金委与工业界的联合资助是推动分子筛催化材料发展的重要手段之一。

目前分子筛催化材料的研究趋势之一是制备具有介孔结构的沸石催化材料 (M. E. Davis, *Nature*, 2003), 特别是在进行了十多年的介孔催化材料研究工作之后, 这一趋势就更加明显, 这是因为介孔材料 (*Nature*, 1992) 对催化应用仍然有着难以克服的缺点: 低的水热稳定性和弱酸性。尽管这些缺点最近得到了一定的克服, 但是仍然达不到工业催化材料的要求。因此, 人们尝试合成具有与目前广泛应用的沸石具有同样好的稳定性和酸性的新材料, 并且要求一定的介孔结构来增加传质作用, 这就是具有介孔结构的沸石分子筛催化材料。有兴趣的是, 今年就有几个研究组发表这一方面的研究成果。

多相催化中的纳米尺寸效应

徐柏庆

(清华大学化学系, 北京 100084)

近 20 年来, 纳米合成化学和纳米表征技术的进步, 使得在纳米尺度上对各类固体的结构、尺寸和形貌进行控制合成或设计制备成为可能。在纳米或分子尺度精密设计和控制多相固体催化剂中活性组分、助剂和载体之间相互作用关系, 认识其中的多尺度结构中的纳米尺寸效应, 正孕育多相催化材料的创新机遇。多相催化剂体系的纳米尺寸效应并非局限于活性组分本身, 在多组分、多尺度负载型催化剂体系“载体”和“助剂”粒子的尺寸对于主催化剂的性质也可能有决定性作用。一方面, 活性组分纳米粒子本身的物理化学性质(结构与电子输、受性质、缺陷性质、酸碱性质等)会因为尺寸改变而变化。另一方面当载体粒子减小到与活性组分(金属或氧化物)纳米粒子的尺寸相近时, 传统意义上的负载型催化剂将会因为其中组成粒子尺寸的相近性而转变为“纳米复合物型”或“纳米建筑物型”催化剂, 其中的尺寸匹配程度很可能显著影响其催化作用或催化反应性质。此外, 即使是人们所熟悉的催化活性组分, 当其处在亚纳米尺度(小于 1.0 nm)时的性质也有可能发生显著改变。因此, 研究与多相催化剂和催化新材料密切相关的纳米尺寸效应的科学规律很可能成为物理化学(结构化学、表面化学、催化反应化学等)的前沿研究领域。

关键词: 多相催化 纳米尺寸效应 催化新材料 非常规催化剂

加强密度泛函理论的研究与应用

徐 昕

(厦门大学化学系, 固体表面物理化学国家重点实验室 厦门
361005)

20 世纪初量子力学的建立开拓了人们对物质世界的新认识, 从原子、分子层次研究和深入认识了“硬物质”, 如金属, 半导体, 陶瓷等等, 对于科学技术和社会的发展产生了巨大的推动作用。21 世纪被称为信息科学和生命科学的世纪, 然而, 任何生命结构是建立在“软物质”(DNA、蛋白质等等)的基础上; 而信息时代更是硬物质(硅半导体)与软物质(液晶)巧妙结合的时代。硬物质以金属键、共价键等为主要化学键型, 软物质 De Gennes 给出一个重要的特征: 弱力引起大变化。氢键和 van der Waals 作用等都属于弱相互作用范畴。

从微观的角度研究我们赖以生存的物质世界的物理、化学性质是一个非常复杂的问题, 尽管Schrödinger的波动方程给了我们所有的化学问题和大部分物理问题的解。体系的状态波函数 $(x_1, x_2, \dots, x_N)$ 依赖于 $4N$ 个变量 (N 为体系电子数, 每个电子有三维空间变量及一维自旋变量), 其复杂性随体系电子数增加而迅速增加。相比之下, 任何体系电子密度 (r) 仅依赖于三维空间变量, 因此采用密度作为搜索变量将大大简化变分求解问题。这构成了密度泛函理论的基础。密度泛函方法是目前唯一有可能应用于大分子体系的基于第一性原理的计算方法。在Kohn-Sham的框架下, 密度泛函方法的计算量与Hartree-Fock方法相当, 甚至更少; 而采用合适的交换相关泛函, 其精度可以达到甚至好过传统后自洽场波函数方法。

国际上, 在理论方面, 密度泛函理论的研究一直十分活跃; 而在应用方面, 多于 90% 以上的计算都是基于密度泛函理论而完成的。虽然目前国内的研究主要集中在常规应用上, 但对密度泛函理论本身和数值方法方面的研究也已有一定的基础。如果给予足够重视和正确引导, 应该可以在国际上占有自己的一席之地, 对密度泛函理论的发展和应用做出应有的贡献。

为此, 我们建议:

1) 针对某些有重大科学意义、国家需求和重大应用背景的热点问题(如涉及能源、环境等的多相、均相及酶催化反应过程), 进行深入系统的密度泛函方法的应用研究, 以解释实验, 总结规律, 抽提新概念为目标。

2) 发展新密度泛函, 以克服现有的泛函还无法合理地描述弱相互作用、以及随着分子尺度的增大, 现有密度泛函方法的误差会不断累加的缺点, 以建立能同时合理描述硬软物质成键特征的新泛函为终极目标。

3) 重视密度泛函新理论体系和新数值计算方法的发展, 并以此进一步拓宽密度泛函的新应用领域(如激发态、动力学、相对论效应以及与光、电和磁的相互作用等), 以达到理论、方法、应用相互促进、共同发展的目标。

分子器件的定量描述和设计

杨金龙

(合肥微尺度物质科学国家实验室, 中国科学技术大学
合肥 230026)

采用自下而上的方式, 人们可以从分子出发设计电子器件。这种思想最初来自于 Aviram 和 Ratner, 他们在 70 年代提出分子整流器的概念。到了 90 年代, 随着实验技术的发展, 单分子器件的研究开始繁荣。发现了许多分子器件所具有的奇特性质, 如整流效应、负微分电导现象和巨磁阻效应等。相应的, 理论也得到了迅速的发展。其中, 非平衡态格林函数方法得到广泛的应用。但从理论上如何定量描述和设计分子器件, 科学上还有许多问题需要解决。本报告将对分子器件理论面临的一些问题: 大分子体系, 分子双结, 电-声耦合作用, 环境与退相干, 瞬时电流, 自旋控制等进行讨论。

我国实验物理化学研究的机遇和挑战

杨学明

(中国科学院大连化学物理研究所 大连 116023)

物理化学是化学学科的一个重要分支,也是当今化学学科的重要研究内容。物理化学的研究内容主要是从宏观到微观的水平上认识化学反应以及分子运动过程的规律。充分理解化学反应以及分子运动过程的规律将极大地促进化学学科前沿的发展,对相关的学科领域和高新技术的发展也将产生深远的影响。近半个世纪以来,物理化学的研究在这两方面都产生了巨大的影响。

近几十来,物理化学的发展逐渐由宏观深入到了原子分子以及量子态的层次。反应过渡态的研究从过渡态的几何形态研究进入到量子化过渡态的研究,而分子动态过程的研究由基态扩展到了激发态的研究。实验和理论物理化学的研究也由单势能面的绝热物理化学深入到了多势能面的非绝热动力学研究。另一方面,反应研究也从基元反应的态态动力学研究扩展到了大分子体系,复杂体系以及界面和凝聚相的动力学研究。而反应过程在时间尺度上的研究也从微秒,纳秒走向飞秒,阿秒。二十年以来,有七项诺贝尔化学奖的获奖研究内容是与物理化学研究密切相关的,充分体现了物理化学学科的科学前沿的特性。

物理化学研究不仅可以揭示了化学反应以及分子运动的机理,还发现和发展了化学激光,揭示了臭氧层破坏的光化学机理,发现了C₆₀等等,极大推动了国防科学、环境科学、催化和材料科学以及生物化学研究的发展。这一系列研究发展趋势构成了当代物理化学研究的主要前沿方向。

我国近几十来的实验物理化学取得了长足的进步,但是也存在着不少问题。这一报告主要将讨论我国在实验物理化学学科发展中存在的问题和挑战,在学科方向,仪器研制,人才培养,学术交流以及合作研究等几个方面提出一些我们的思考供大家参考。

固态物理化学研究的前沿及发展趋势

杨 勇

(固体表面物理化学国家重点实验室, 厦门大学化学系, 厦门,
361005)

固态化学 (Solid State Chemistry) 是一门研究固态材料的化学合成、结构及其性能的化学分支学科, 它同时也是将化学与材料、能源、信息等学科紧密相连的学科, 近二十年来得到快速的发展。由于人们对固态材料的性能及其调控寄予厚望, 固态物理化学的研究与发展将得到更多的重视和关注, 固态物理化学主要是采用固体物理的理论与方法研究固态材料体相/表面中发生的化学反应及过程。

无机/有机固态物质中所发生的化学反应与固态物质中电子和离子的运动方式及过程密切相关, 而且也带来一系列物理性质的变化 (如结构相变、电导、磁学及其能带与电子结构变化等等)。研究固态中电子/离子的输运过程及其影响因素, 新型化合物 (新相) 的形成及其转变, 固态物质的表面相与体相的组分和结构关系等等显然非常重要: 例如如何准确测量、分析电子/离子在固体中运动方式、运动速度以及电子/离子在晶格中迁移时所伴随发生的阴阳离子价态变化及其新化合物的形成等。人们对这些重要物理/化学过程及其规律的认识, 不仅关系到无机/有机固态化学反应机理的研究工作, 其实更应该是新世纪物理化学所应该关注的领域。例如: 锂离子在电极/电解质材料中输运过程与高性能的锂离子电池, 质子 (H^+) /氧负离子 (O^{2-}) 在电极/电解质中的输运过程与燃料电池、电冶金等密切相关。同样在催化科学中, 催化材料中表面“活性氧物种”与催化剂/催化剂固相载体中 O^{2-} 的活度及其变化有密切关系。近年来纳米尺度的电子转移 (纳电子学) 受到很多的关注, 但纳米尺度材料上的离子迁移过程人们却关注的不多。最近纳米离子学得到部分研究组的关注, 并取得一定的进展。今后固态物理化学的研究中, 选取合适的模型体系和选用先进的实验分析手段非常重要, 在研究体系方面: 单晶材料体系, 有序纳米结构体系 (纳米粒子、纳米线/管, 纳米薄膜), 甚至生物膜体系都可能提供多种丰富的研究体系, 而各种新型高效的结构和性能分析手段如 HRTEM, EXAFS, XANES, SQUID, NMR 以及电子场发射等均为分析固态材料中的微区结构、配位环境及其缺陷结构等提供强有力的实验证据。本文将几个实例介绍有关领域的研究进展和发展趋势。

凝聚态的光化学过程及特性研究

姚建年

(中国科学院化学研究所 北京 100080)

现代分子光化学的发展大大开拓了人们对物质认识的深度和广度，为了解生命体系和分子及其凝聚态体系中发生的能量、电子转移和光化学过程提供了重要的基础。同时，光化学的研究又与许多重要高新技术的发展有着密切的联系。因此，光化学的研究在基础理论和高新技术应用方面都有十分重要的意义。

凝聚态光化学的研究是国际上十分活跃的研究领域之一。现在，国际上光化学的发展形成了新的态势：首先，在时间尺度上，时间分辨技术的发展使得超快过程的研究成为可能，也为原位、实时探测各种光化学和光物理过程提供了技术保障。其次，在空间尺度上，正由分子层次向分子以上层次发展，凝聚态光化学的研究日益重要。第三，基础研究与高新技术应用研究的结合越来越紧密，凝聚态光化学的研究为光功能材料和器件的发展提供了基础。第四，随着纳米技术与光化学的融合，出现了新的科学增长点，如纳米光化学等。我国从事光化学研究的历史已有三十多年，建立了现代的实验手段，培养形成了一支较强的光化学研究队伍，取得了不少受到国际同行重视的研究成果。但是，随着国际上光化学研究的不断深入和创新，各国纷纷在实验新手段的建立和学科新增长点等前沿领域的布局上面投入大量的人力和物力；在以光子为信息和能量载体的应用领域，如光信息记录、显示和存储材料、非线性光学材料、太阳能电池、光化学环保技术、发光材料以及光与生命体系的相互作用等诸多方面的一些基本问题还有待深入地研究。

理论分子反应动力学的发展瓶颈

张东辉

(中科院大连化学物理研究所 大连 116023)

今年10月, Journal of Chemical Physics为庆祝1986年诺贝尔化学奖获得者李远哲先生的70寿辰罕有地发行化学反应动力学的专刊。专刊中所涉及的动力学研究范围之广之深表明了分子反应动力学近40年的发展为我们在原子分子水平认识化学反应的本质与机理, 以及最终控制化学反应作出了巨大贡献。原则上讲, 从理论的角度研究化学反应动力学并不复杂: 首先通过分离被研究体系中的电子和原子核的运动, 运用量子化学方法计算不同原子核构型下原子核间的相互作用能; 然后 根据计算得到的相互作用能构造原子核间相互作用的势能面; 在该势能面上解关于核运动的量子力学的方程便可得到这些过程的所有动力学信息。但是由于量子力学中的薛定谔方程是一个偏微分方程, 无论是电子运动还是核运动方程的求解, 他们的计算量都随体系中电子或核数量的增加而迅速增加, 从而成为理论分子反应动力学发展的根本瓶颈。

超分子物理化学的进展与动态

张 希

(清华大学化学系 北京 100084)

超分子化学是指以多种分子间弱相互作用为基础,以分子聚集体为研究对象的化学。经过 20 多年的发展,超分子化学已形成了自己独特的概念和体系,如分子识别、分子自组装、超分子材料、超分子器件等,构成了化学大家族中一个颇具魅力的新学科。同时,超分子的思想使得人们重新审视许多传统但仍具挑战的已有学科分支,并给它们带来了新的发展空间。尽管超分子化学已有长足的进步,但总的看来,该领域实验的进展远超前于理论,也因此给超分子物理化学的研究带来了机遇。那么,超分子物理化学的研究涉及到哪些方面的内容呢?其发展的瓶颈或困难是什么?

在超分子化学中,“组装”的重要性就如同分子化学中的合成。自组装是指自发地形成有序结构的过程,它是组装的高级层次。目前,大多数自组装研究集中于自组装的方法和组装体的性能,缺乏对自组装动态过程和解组装动态过程的深入认识;涉及物质和能量交换的动态自组装的研究尚处于初级阶段。因此,应倡导建立新型的多级自组装方法,揭示自组装和解组装过程的规律,实现可控的分子自组装,从而为构筑更加高级复杂的自组装体系提供依据。

分子自组装的实现依赖于分子间键。分子间键是分子间弱相互作用,包括范德华力、疏水亲脂作用、氢键、静电相互作用、 π - π 堆积力等。分子自组装涉及分子间作用力的加合与协同,由此产生一定的方向性和选择性,从而决定了分子识别与位点识别,驱动构筑基元的自组装。弄清分子间弱相互作用如何加合与协同,协同、加合的结果又怎样产生方向性和选择性是发展新的自组装方法和理解组装体功能的前提。

分子识别就是这种弱相互作用结合的体现,它是形成高分子有序功能结构的关键。但值得指出的是:在有机相中获得的分子识别规律难于适用水相体系。因此,加强水相中的分子识别研究,揭示水相中分子识别的规律,不仅可能导致建立基于特异性作用的可控自组装方法,也有助于认识生物体系中的组装与功能。

超分子化学的发展正在从单一的结构构筑,迈向结构构筑与功能组装的统一。超分子体系的功能是多种多样的,但都离不开信息传输。它包括分子水平上的信息存储,以及超分子尺寸上的修正、传输和处理。信息传输的本质是能量传递、物质输运和化学转换。因此,揭示分子聚集体中的电子转移、能量传递和化学转换规律是超分子物理化学的另一重要方向。

化学生物学—物理化学的一个生长点

赵新生

(北京大学化学学院化学生物学系, 北京 100871)

化学生物学是一个新型的化学与生物学的交叉学科。它的基本任务是运用化学的原理、语言和工具认识生命问题, 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。化学生物学对生命现象的研究, 更加注重认识生命的动态(瞬态)化学性质和运动规律, 更加注重化学物质、特别是外源性化学物质(如药物)对生命运动的影响和调控, 更加注重新的化学技术和方法(如实时、快速、无损、高灵敏、高通量的化学分析)在生命科学中的应用, 这是化学生物学与传统的生物化学以及分子生物学的显著区别。化学生物学作为一个化学与生物学的新兴交叉学科为整个化学学科的发展带来新的机遇, 也是物理化学的一个生长点。物理化学不应错过这一重要的发展机遇, 要积极参与化学生物学学科的建设和发展, 通过自己的参与和贡献, 争取到物理化学在化学生物学中的应有地位, 以便利用这一机会促进自身的发展, 通过我们自己取得的突出成绩提高物理化学在化学生物学乃至整个生命科学中的地位、作用和显示度。