

太原理工大学
煤科学与技术省部共建
国家重点实验室培育基地

量子化学计算课题组

2013年度报告

责任编辑：刘志雪（2012级）

卷首语

岁月的长河在流动，时间的脚步不停息。不知不觉已翻到2013年的最后一页，回首2013年，我们在欢声笑语中收获成长与进步。在此，衷心感谢支持、帮助课题组的领导、老师、同事和朋友！

2013年，课题组发表SCI、EI论文15篇，其中一区、二区论文10篇，在质量上较去年有大幅度提升；

2013年，授权国家发明专利1项，这是该年份的重大突破；

2013年，章日光老师破格聘任为我校教授；

2013年，1位博士和3位硕士顺利毕业，同时迎来3位（2位合作）博士生和5位硕士生，为实验室注入了新的活力；

2013年，课题组章日光、凌丽霞两位老师分别获得校优秀青年培育项目和青年团队项目资助；

2013年，凌丽霞老师完成博士后工作顺利出站，合作导师为我校材料科学与技术学院韩培德教授；

2013年，课题组研三王贵儒同学荣获研究生国家奖学金；

2013年，实验室新增座位10个，目前已达到32个；

花吐蕊，叶抽芯，2014年悄然而至，我们在和煦的春风中播种希望，不断收获成长和成功！

2014年，我们翘首企盼！



课题组成员

课题组老师:

王宝俊: 博导、教授

章日光: 博士、教授

凌丽霞: 博士、讲师



研究生:

博士: 智翠梅、侯锦秀、吴建兵、白官、王勇 (合作)、李对春 (合作)

研三: 王贵儒、牛晓琦、张通、王刚、齐君 (合作)

研二: 刘志雪、郭晓强、赵晓俊、章丽娜、赵森鹏、管涛涛 (合作)

研一: 郝晓斌、段甜、黄婷婷、樊丽丽、齐冀

2013年在研基金项目

1. Ni基催化剂作用下CH₄/CO₂重整反应体系中积碳问题

研究目标:

采用量子化学DFT理论计算和结构表征相结合的方法,建立积碳生成的微观动力学,在电子水平上阐明积碳问题的微观原因,及催化剂的成分、组成、微晶和表面结构等主要因素与抗积碳性能的构效关系,为Ni基催化剂的筛选和改性,以及有针对性地设计新型催化剂,提供基本的理论线索。

基金支持: 国家自然科学基金(21276171),经费82万元

起止年月: 2013.01~2016.12

项目负责人: 王宝俊

2. 甲烷-合成气两步阶梯反应合成乙酸的反应机理

研究目标:

对甲烷-合成气两步阶梯反应合成乙酸进行研究,采用量子化学计算和实验相结合的方法,从催化剂构效关系、反应热力学和动力学方面阐明金属催化剂作用下甲烷-合成气两步阶梯反应合成乙酸的反应机理,为实验筛选并提出适宜的金属催化剂。

基金支持: 国家自然科学基金青年面上连续资助项目(21276003),经费80万元

起止年月: 2013.01~2016.12

项目负责人: 章日光

3. 热解和气化煤气中 H_2S 和 Hg 同时脱除的理论研究

研究目标:

a) 从分子水平上阐明 H_2S 和含 Hg 物种在脱除剂表面的吸附机理和它们在脱除过程中的变化规律, 阐明脱除剂的微观结构和效能的关系; b) 构建 H_2S 和含 Hg 物种在脱除剂表面的共吸附模型, 得到以基元反应为基础的同时脱除的反应机理; c) 在实践上提供理论线索, 在理论上建立一套基于基元反应的脱除反应机理。

基金支持: 国家自然科学基金青年基金 (21103120), 经费25万元

起止年月: 2013.01~2016.12

项目负责人: 凌丽霞

4. 全国重点煤矿区瓦斯 (煤层气) 赋存规律和控制因素

研究目标:

依据量子化学密度泛函理论计算方法, 从分子水平上揭示构造煤的形成机制; 找出构造煤形成过程中的排烃地球化学标志; 确立预测煤与瓦斯突出指标, 从微观和实验两个方面分析渗透性控制因素。

基金支持: 国家科技重大专项任务 (2011ZX05040-005), 经费40.57万元

起止年月: 2011.01~2013.12

项目负责人: 王宝俊

5. 铁基氧化物对煤气中 H_2S 和 Hg 同时脱除的微观动力学研究

研究目标:

- 阐明 H_2S 和 Hg^0 在 Fe_2O_3 作用下的共脱除反应机理, 为 H_2S 和 Hg^0 的共脱除提供理论指导;
- 通过对 Fe_2O_3 表面掺杂改性的研究, 为高效脱硫脱汞的脱除剂的筛选和金属掺杂改性提供基本的理论线索。

基金支持: 第52批博士后基金 (2012M520608) , 经费5万元

起止年月: 2012.09~2013.06

项目负责人: 凌丽霞

6. 校基金资助项目

项目名称: Cu基催化剂上甲烷-合成气定向合成乙醇的催化基础理论 (优秀青年培育项目)

项目负责人: 章日光

项目名称: 非贵金属催化剂上基于合成气合成乙醇的反应机理研究 (青年团队项目)

项目负责人: 章日光 (团队负责人)

项目名称: 改性铁基吸附剂对煤气中 H_2S 和 Hg 同时脱除的理论研究 (青年团队项目)

项目负责人: 凌丽霞

2013年申请获得发明专利

发明名称：一种紫外光固化胶粘剂及其制备方法

摘要：

一种紫外光固化胶粘剂及其制备方法，属于光固化胶粘剂领域，其特征在于：它是一种先反应得到自制预聚物，后加入其它成分制得光固化胶粘剂的方法，其成分重量比例为：自制预聚物30-40份，N, N-二甲基丙烯酰胺10-15份，丙烯酸异冰片酯10-20份，甲基丙烯酸羟乙酯10-15份，1, 6-己二醇二丙烯酸酯5-10份，2-羟基-2-甲基-1-苯基-1-丙基酮4-6, 2, 4, 6-三甲基苯基甲酰基二苯基氧化膦0.5-1.5份。本发明胶粘剂可用于PVC、PET、PP、PC多种有机基材与玻璃之间的粘合，具有强度高、粘度小、固化速度快、污染小等特点，弥补了现有光固化胶粘剂的不足，用途极其广泛。

发明人：凌丽霞、章日光、吴建兵

专利号：ZL.201110175551.8

专利权人：太原理工大学

2013年发表的学术论文

1. Riguang Zhang, Guiru Wang, Baojun Wang. Insights into the mechanism of ethanol formation from syngas on Cu and an expanded prediction of improved Cu-based catalysts. *Journal of Catalysis*, 2013, 305: 238-255(SCI, 1区)
2. Riguang Zhang, Xuancheng Sun, Baojun Wang. Insight into the preference mechanism of $\text{CH}_x(x=1-3)$ and C-C chain formation involved in C_2 oxygenates formation from syngas on Cu(110) surface. *Journal of Physical Chemistry C*, 2013, 117(13): 6594-6609(SCI, 2区)
3. Jiajia Song, Xiaoqi Niu, Lixia Ling, Baojun Wang. A density functional theory study on the interaction mechanism between H_2S and the $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3(0001)$ surface. *Fuel Processing Technology*, 2013, 115: 26-33(SCI, 2区)
4. Jingrui Li, Riguang Zhang, Baojun Wang. Influence of the hydroxylation of $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ surfaces on the stability and growth of Cu for Cu/ $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ catalyst: A DFT study. *Applied Surface Science*, 2013, 270: 728-736(SCI, 2区)
5. Xuancheng Sun, Riguang Zhang, Baojun Wang. Insights into the preference of $\text{CH}_x(x=1-3)$ formation from CO hydrogenation on Cu(111) surface. *Applied Surface Science*, 2013, 265: 720-730(SCI, 2区)

6. Lixia Ling, Peide Han, Baojun Wang, Riguang Zhang. DFT study on the regeneration mechanism of ZnO surface during the desulfurization of H₂S. *Fuel Processing Technology*, 2013, 109: 49-56(SCI, 2区)
7. Riguang Zhang, Jingrui Li, Baojun Wang. The effect of Si/Al ratios on the catalytic activity of CuY zeolites for DMC synthesis by oxidative carbonylation of methanol: A theoretical study. *RSC Advances*, 2013, 3: 12287-12298(SCI)
8. Riguang Zhang, Jingrui Li, Baojun Wang, Lixia Ling. Fundamental studies about the interaction of water with perfect, oxygen-vacancy and pre-covered oxygen Cu₂O(111) surfaces: Thermochemistry, barrier, product. *Applied Surface Science*, 2013, 279: 260-271(SCI, 2区)
9. Lixia Ling, Riguang Zhang, Peide Han, Baojun Wang. DFT study on the sulfurization mechanism during the desulfurization of H₂S on the ZnO desulfurizer. *Fuel Processing Technology*, 2013, 106: 222-230(SCI, 2区)
10. Guiru Wang, Riguang Zhang, Baojun Wang. Insight into the preference mechanism for C-C chain formation of C₂ oxygenates and the effect of promoters in syngas conversion over Cu-based catalysts. *Applied Catalysis A: General*, 2013, 466: 77–89(SCI, 3区)

11. Hongyan Liu, Baojun Wang, Maohong Fan, Neil Henson, Yulong Zhang, Brian Francis Towler, H. Gordon Harris. Study on carbon deposition associated with catalytic CH₄ reforming by using density functional theory. *Fuel*, 2013, 113: 712–718(SCI, 2区)
12. Lixia Ling, Peide Han, Baojun Wang, Riguang Zhang. Theoretical prediction of simultaneous removal efficiency of ZnO for H₂S and Hg⁰ in coal gas. *Chemical Engineering Journal*, 2013, 231: 388-396(SCI, 2区)
13. Jianbing Wu, Junbao Xie, Lixia Ling, Guozhang Ma, Baojun Wang. Surface modification of nanosilica with 3-mercaptopropyl trimethoxysilane and investigation of its effect on the properties of UV curable coatings. *Journal of Coatings Technology and Research*, 2013, 10(6): 849-857(SCI, 4区)
14. Jianbing Wu, Tong Zhang, Guozhang Ma, Ping Li, Lixia Ling, Baojun Wang. Synthesis of a tung oil–rosin adduct via the Diels–Alder reaction: Reaction mechanism and properties in an ultraviolet-curable adhesive. *Journal of Applied Polymer Science*, 2013, 130(6): 4201-4208(SCI, 4区)
15. 吴建兵, 凌丽霞, 马国章, 王宝俊. 巯基-乙烯基点击反应在紫外光固化过程中的应用. *高分子材料科学与工程*, 2013, 29(10): 169-174(EI)

2013年课题组学术活动

- 2013.01.18 一碳化学课题组李忠教授、郑华艳讲师来我课题组参加合作培养同学齐君的开题报告
- 2013.04.01 新疆大学副校长贾殿赠一行参观课题组，王宝俊教授向大家介绍课题组的研究方向及工作环境等情况
- 2013.05.29 课题组2010级硕士生李静蕊、孙炫成、宋佳佳进行硕士毕业答辩，答辩委员会由太原理工大学韩培德教授（委员会主席）、李忠教授、梁伟教授组成，三位硕士生顺利通过答辩，获得工学硕士学位授予资格
- 2013.06.03 太原理工大学煤科学与技术重点实验室常丽萍教授和李凡教授、化学化工学院曹青教授和赵彦生教授、山西省化工研究院王克智总工程师及山西省应化所马国章所长参加课题组2009级博士生章日光博士论文预答辩及2012级博士生吴建兵的开题报告
- 2013.06.07 课题组09级博士生章日光进行博士毕业答辩，答辩委员会由山西师范大学武海顺教授（委员会主席）、中科院煤化所谭猗生研究员、山西大学王越奎教授、太原理工大学董晋湘教授、李瑞丰教授、李凡教授、韩培德教授组成。委员会一致同意通过章日光博士的论文答辩，并建议授予其工学博士学位

2013年课题组学术活动

- 2013.07.13 王宝俊教授作为评审专家应邀参加中国矿业大学(徐州)举办的“煤焦油制备碳纤维关键技术及配套设备研讨会”
- 2013.07.27 王宝俊教授应邀参加“分子材料与技术研讨会暨庆祝山西大分子科学研究所成立30周年”会议并作交流报告
- 2013.07.29 王宝俊、章日光、凌丽霞三位老师参加在太原举办的首届能源转化化学与技术研讨会
- 2013.09.12 课题组邀请国家“千人计划”特聘教授、中国科学院山西煤炭化学研究所焦海军研究员作了题为“Theoretical tools of catalyst design: Understanding the Adsorption of H₂ and CO on clean iron surfaces from atomistic thermodynamics”的讲座
- 2013.09.12 中国海洋大学李春虎教授一行人参观课题组，章日光教授向各位老师介绍了课题组主要研究工作

2013年课题组学术活动

- 2013.10.13 课题组博士生白官参加由源资信息科技（上海）有限公司在吉林大学举办的“美国Gaussian公司全球暨首届大中华区理论及应”培训班
- 2013.10.21 凌丽霞、王贵儒、章丽娜和齐君参加了由中国化学会主办、苏州大学承办的“第十二届全国计算（机）化学学术会议”
- 2013.12.04 加拿大西安大略大学张辉教授参观我课题组，王宝俊教授向大家介绍课题组的软硬件设施、承担项目等基本情况
- 2013.12.17 华中科技大学化学与化工学院院长解孝林教授参观课题组，王宝俊教授介绍了课题组情况

2013年课题组毕业学生



姓名：章日光（博士）

论文题目：一碳反应中Cu基催化剂的结构调变与性能调控的基础理论



姓名：李静蕊（硕士）

毕业去向：湖北三宁化工股份有限公司

论文题目：CuY和Cu/ γ -Al₂O₃催化剂载体性质对甲醇氧化羧基化催化性能的影响

2013年课题组毕业学生



姓 名：孙炫成（硕士）

毕业去向：武汉天和技术股份有限公司

论文题目：Cu催化剂上合成气合成乙醇的反应机理研究



姓 名：宋佳佳（硕士）

毕业去向：天津大学攻读博士学位

论文题目：氧化铁基脱硫剂对 H_2S 的脱除及脱硫剂的再生机理研究

2012-2013学年第二学期学术例会

时间	汇报内容	报告人	主持人
3月7日	假期任务完成情况、智翠梅开题报告	宋佳佳, 李静蕊, 孙炫成, 智翠梅	郭晓强
3月14日	假期任务完成情况 & 新学期安排	王贵儒, 张通, 王刚	章丽娜
3月21日	新学期工作安排	齐君, 王勇, 牛晓琦	王刚
3月28日	学习情况汇报	刘志雪, 章丽娜, 赵晓俊, 赵森鹏, 郭晓强, 管涛涛	齐君
4月11日	大论文进展情况	宋佳佳, 李静蕊, 孙炫成	刘志雪
4月18日	近期工作汇报	王贵儒, 牛晓琦, 张通, 王刚	赵晓俊
4月25日	近期工作汇报	智翠梅, 齐君, 王勇	王刚
5月2日	文献阅读情况	刘志雪, 章丽娜, 赵晓俊, 赵森鹏, 郭晓强, 管涛涛	王勇
5月16日	预答辩	宋佳佳, 李静蕊, 孙炫成, 章日光	管涛涛
5月30日	近期工作汇报	王贵儒, 牛晓琦, 张通, 王刚	赵森鹏
6月6日	近期工作汇报	智翠梅, 齐君, 王勇, 吴建兵	王刚
6月20日	开题报告	刘志雪, 章丽娜, 赵晓俊, 赵森鹏, 郭晓强, 管涛涛	凌丽霞
7月4日	假期安排	全体学生	章日光

2013-2014学年第一学期学术例会

时间	汇报内容	报告人	主持人
9月13日	假期任务完成情况及新学期安排	王贵儒, 牛晓琦, 齐君, 王刚, 张通	管涛涛
9月27日	假期任务完成情况及近期工作汇报	章丽娜, 刘志雪, 赵森鹏, 郭晓强, 管涛涛, 赵晓俊	王刚
10月11日	近期工作汇报	智翠梅, 李对春, 王勇	郭晓强
10月25日	近期工作汇报	王贵儒, 牛晓琦	王刚
11月1日	近期工作汇报	齐君, 王刚, 张通	章丽娜
11月8日	近期工作汇报	章丽娜, 刘志雪, 赵森鹏	王刚
11月15日	近期工作汇报	郭晓强, 管涛涛, 赵晓俊	赵森鹏
11月22日	近期工作汇报	智翠梅, 白官, 吴建兵	王刚
11月29日	大论文提纲汇报	王贵儒, 牛晓琦	刘志雪
12月6日	大论文提纲汇报	齐君, 王刚, 张通	管涛涛
12月13日	近期工作汇报	章丽娜, 刘志雪, 赵森鹏	赵晓俊
12月20日	近期工作汇报	郭晓强, 管涛涛, 赵晓俊	王刚
12月27日	近期工作汇报	智翠梅, 李对春, 王勇	郭晓强
1月10日	假期安排 进入实验室感受	全体同学 研一	凌丽霞

难忘瞬间回放



牛晚琦同学近期汇报



王老师与郭晓强同学



凌老师主持会议



王贵儒同学关于审稿意见的报告



王老师与章丽娜同学

Quantum Chemistry Research Group

Annual Report

2013

难忘瞬间回放



乌金山一日游



王老师家聚会



与2010级毕业生合影



王老师参加学术会议现场



实验室环境展示

难忘瞬间回放



阎瑞霞结婚照



王老师怀抱荆雯家的小宝宝



王老师在放风筝



赛场上的赵晓俊同学



章老师与郭晓强同学组合



课间运动中

发现问题 提出问题
分析问题 解决问题

感谢国家自然科学基金项目的支持!

感谢各位老师的指导!