

量子化学课题组 2011 Annual Report

太原理工大学山西省煤科学与技术重点实验室
—省部共建国家重点实验室培育基地

**Key laboratory of coal science and technology
Ministry of education and shanxi province
Taiyuan University of Technology**

卷首语

梦想不断延伸，脚步依旧执著。

我们共同经历了一个充满各种滋味的2011年，又一起迎来了2012年。回望2011，十二五计划正式开工；中国GDP上升为世界第二；日本地震海啸，引发“核危机”；动车出轨，安全隐患犹存；乔帮主逝世，金二胖上船……；总之2011充满了不可思议。在这不平凡的一年，课题组依旧硕果累累，科研力量不断壮大。

2011年，课题组新增一项国家自然科学基金青年基金，共承担基金项目5项。

2011年，课题组发表SCI论文12篇，比去年有所进步。

2011年，课题组计算软件Materials Studio升级到5.5版本，引进VASP 5.2，新增4台32核服务器，IB交换机，高速网卡，计算能力显著提高。

2011年，三位硕士顺利毕业，又迎来一位博士，四位硕士，给实验室注入新鲜血液。

2011年，凌丽霞，章日光两位老师先后喜得贵子，幸福指数一路攀升。

回首2011，课题组硕果累累，我们心存感激，感谢支持我们和帮助过我们的人。充满希望和挑战的2012即将到来，我们将用铿锵的誓言，不懈的努力，共同奋斗，创造辉煌的明天。

课题组成员

教授



王宝俊，教授、博导。目前在太原理工大学煤科学与技术教育部和山西省重点实验室从事煤结构与反应性的量子化学研究工作。主持并参加国家973项目和国家自然科学基金项目等10余项，获省部级科技进步理论成果二等级以上3项，发表学术论文60余篇。

讲 师：章日光、凌丽霞

研究生：博士：刘红艳、智翠梅、侯锦秀

研三：宋录智、阎瑞霞、胡文飞、薛金祥、
解晓东

研二：李静蕊、孙炫成、宋佳佳

研一：牛晓琦，王贵儒，张通，王刚

2011年在研基金项目

1. 热解和气化煤气中含硫化合物的转化和脱除

研究目标:

从分子水平上阐明热解和气化煤气中含硫化合物化学键断裂方式, 阐明硫在催化转化和脱除过程中的变化规律, 阐明催化剂和脱硫剂的微观结构和效能的关系。从而在实践上为优化含硫化合物转化和脱除的工艺条件建立基本的理论方法, 为高效催化剂和高效易再生脱硫剂的筛选提供基本的理论线索。

基金支持: 国家自然科学基金项目(60976115), 经费34万元

起止年月: 2010.10 ~ 2012.12

项目负责人: 王宝俊

2. 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: 2012.01 ~ 2014.12

项目负责人: 凌丽霞

3. CH₄-CO₂等温两步反应合成乙酸的热力学、动力学研究

研究目标:

阐明CH₄-CO₂两步梯阶转化直接合成乙酸的反应热力学、动力学基础, 建立一个能够比较准确地描述两步反应热力学、动力学的模型体系和方法。

基金支持: 国家自然科学基金青年基金(20906066), 经费20万元

起止年月: 2010.01 ~ 2012.12

项目负责人: 章日光

4. 煤气脱硫机理的量子化学研究

研究目标:

依托量子化学密度泛函理论计算方法, 研究氧化铝和氧化铁为基体的催化剂和脱硫剂作用下的脱硫反应, 从分子水平阐明催化转化和脱硫反应, 从电子-分子水平阐明其作用原理。统一阐明不含硫组分对催化和脱硫过程的影响。项目可以为高效催化剂和高效易再生脱硫剂的筛选和金属掺杂改性, 以及优化工艺条件提供基本的理论线索。

基金支持: 教育部博士点基金(20091402110013), 经费3万元

起止年月: 2010.1 ~ 2012.12

项目负责人: 王宝俊

5. 煤热解反应中分子内氢原子转移与氮、硫迁移规律的关系

研究目标:

形成一个比较准确地描述煤热解反应中分子内氢原子转移过程与氮、硫迁移规律关系的模型化合物体系。建立一个正则振动光谱分析与热解-红外光谱、电子顺磁共振光谱测定相结合,用于研究煤中含氮、含硫模型化合物热解反应分子内氢原子转移和其他自由基过程反应机理的理论和方法;理论上阐明煤炭高效、洁净利用过程的氮、硫迁移规律的若干关键化学问题。

基金支持: 山西省自然科学基金(2009021015), 经费5万元

起止年月: 2008.01 ~ 2011.12

项目负责人: 章日光

2011年课题组发表的学术论文

1. Zhang Riguang, Liu Hongyan, Ling Lixia, Li Zhong, Wang Baojun. A DFT study on the formation of CH_3O on $\text{Cu}_2\text{O}(1\ 1\ 1)$ surface by CH_3OH decomposition in the absence or presence of oxygen. *Applied Surface Science*, 2011, 257(9): 4232-4238 (SCI)
2. Riguang Zhang, Lixia Ling, Zhong Li, Baojun Wang. Solvent effects on $\text{Cu}_2\text{O}(1\ 1\ 1)$ surface properties and CO adsorption on $\text{Cu}_2\text{O}(1\ 1\ 1)$ surface: A DFT study. *Applied Catalysis A: General*, 2011, 400(1-2): 142-147 (SCI)
3. Riguang Zhang, Hongyan Liu, Baojun Wang, Jun Ren, Zhong Li. Adsorption and dissociation of O_2 on $\text{CuCl}(1\ 1\ 1)$ surface: A density functional theory study. *Applied Surface Science*, 2011, 258(1): 408-413 (SCI)
4. Jianming Liang, Riguang Zhang, Qiang Zhao, Jinxiang Dong, Baojun Wang, Jinping Li. Molecular simulation of hydrogen storage in ion-exchanged Mazzite and Levynze zeolites. *Computational and Theoretical Chemistry*, In Press, Available online 11 November 2011 (SCI)
5. Hongyan Liu, Riguang Zhang, Ruixia Yan, Baojun Wang, Kechang Xie. CH_4 dissociation on $\text{NiCo}(1\ 1\ 1)$ surface: A first-principles study. *Applied Surface Science*, 2011, 257(21): 8955-8964 (SCI)
6. Hongyan Liu, Riguang Zhang, Fangyuan Ding, Ruixia Yan, Baojun Wang, Kechang Xie. A first-principles study of $\text{C} + \text{O}$ reaction on $\text{NiCo}(1\ 1\ 1)$ surface. *Applied Surface Science*, 2011, 257(22): 9455-9460 (SCI)

7. Riguang Zhang, Hongyan Liu, Huayan Zheng, Lixia Ling, Zhong Li, Baojun Wang, Adsorption and dissociation of O₂ on the Cu₂O(111) surface: Thermochemistry, reaction barrier. *Applied Surface Science*, 2011, 257(11): 4787-4794 (SCI)
8. Riguang Zhang, Baojun Wang, Hongyan Liu, and Lixia Ling Effect of Surface Hydroxyls on CO₂ Hydrogenation Over Cu/ γ -Al₂O₃ Catalyst: A Theoretical Study . *J. Phys. Chem. C*, 2011, 115 (40): 19811–19818 (SCI)
9. HongyanLiu, RuixiaYan, RiguangZhang, BaojunWang, Kechang Xie. A DFT theoretical study of CH₄ dissociation on gold-alloyed Ni(111) surface, *Journal of Natural Gas Chemistry*, 2011, 20 (6): 611-617 (SCI)
10. Baojun Wang, Luzhi Song, Riguang Zhang. The dehydrogenation of CH₄ on Rh(1 1 1), Rh(1 1 0) and Rh(1 0 0) surfaces: A density functional theory study. *Applied Surface Science*, 2011, doi:10.1016/j.apsusc.2011.12.012 (SCI)
11. Jinxiang Xue, Riguang Zhang, Yanping Liu, Baojun Wang. The alloying of Ti, C, N in bulk α -Fe and their effects on bond characters, *Acta Phys. Sin.* (SCI)
12. Xiaodong Xie , Yuying Hao , Riguang Zhang, Baojun Wang . Lithium-doped tris (8-hydroxyquinoline) aluminum studied by density functional theory, *Acta Phys. Sin.* (SCI)

2011年课题组参加的学术会议

- 1、王宝俊、刘红艳和阎瑞霞参加了由中国化学会主办、中国科学技术大学化学与材料科学学院和合肥微尺度物质科学国家实验室承办的“第十一届全国量子化学会议”，中国合肥。2011.5.27 ~ 2011.5.30

会议论文：

《第一性原理研究SMSI对 CH_4 解离的影响—电子气模型》刘红艳

《Ni-M(M=Mn,Fe,Co,Cu)和MgO之间的相互作用及其对 CO_2 吸附的影响》
阎瑞霞

- 2、章日光、刘红艳、阎瑞霞和宋录智参加了由中国科学院山西煤化所主办的“The 11th China Japan Symposium on Coal and C1 Chemistry”。中国银川。2011.08.05~2011.08.07

口头报告：

《Thermodynamics of Direct Synthesis of Acetic Acid by a CH_4/CO_2 Two-step Isothermal on Co/Cu Caralysts》章日光

张贴报告：

《Effect of strong lateral interaction between coadsorption on C+O reaction on Ni(111) surface: A first-principles study》刘红艳

《Interactions of Ni-M (Mn, Fe, Co, Ni and Cu) with $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ (110) Surface and Their Effects on the Adsorption of CO_2 》阎瑞霞

《The Dehydrogenation of CH_4 on Rh(HKL) Surface: A Density functional Theory Study》宋录智

2011年课题组参加的学术会议

- 3、王宝俊参加了由兰州大学和甘肃省计算中心承办的第十一届全国计算（机）化学学术会议。中国·兰州。
2011.08.05~2011.08.07

- 4、刘红艳、智翠梅参加了由创腾公司举办的2011年材料科学暑期培训班——Materials Studio 高级培训班。中国·北京。
2011.8.16-2011.8.19

- 5、宋录智参加了北京宏剑公司及中科院半导体所主办的全国首届VASP软件研讨培训班。中国·北京。
2011.6.28~2011.6.30

- 6、课题组全体成员参加了由中科曙光有限公司组织的linux系统和并行计算平台的操作培训。中国·太原
2011.3.23~2011.3.24

2011年课题组学术交流活动

2011.01.14 量子化学课题组全体师生到晓明研究室进行参观学习

2011.03.02 牛津大学崔占峰教授到我课题组参观，章老师为崔教授简要介绍了课题组的研究方向

2011.03.05 薛绍武、李剑锋两位博士来我课题组参观，二位是王宝俊教授带过的本科学生，目前在不同的高校任教

2011.03.28 美国南伊利诺伊斯大学卡本戴尔校区煤研究中心John S. Mead博士来我课题组参观，凌老师为John S. Mead博士简要的介绍了本课题组的研究方向

2011.06.07 美国南伊利诺伊斯大学代表团副校长John Koropchak、助理副校长、研究生院院长David L. Wilson、煤研究中心主任助理Tomasz Wiltowski来我课题组参观。章日光老师简要的介绍了本课题组的研究方向

2011.07.15 牙买加西印度大学莫纳分校校长Gordon Shirley带领莫纳分校孔子学院代表团来我课题组参观，刘红艳博士对我课题组的研究方向及方法进行了简要的介绍

2011.07.28 山西大学赵永祥教授带领其课题组成员来我课题组进行了学术交流，四名博士生做了学术报告

2011.10.17 山西大学副校长李思殿一行来我实验室参观，王老师亲自做了详细的介绍，介绍了实验室的服务器、软件设施等相关的计算条件、实验室的主要研究方向、实验室发表的论文和基金等。李校长等给予好评

2011年6月毕业的研究生



姓名：王丽平

毕业去向：河北省石油化工设计院有限公司

论文题目：煤的抽提过程中 CS_2/NMP 与煤中氢键作用的量子化学研究



姓名：梁建明

毕业去向：山西潞安太阳能科技有限责任公司

论文题目：离子交换型Mazzite及Levyne沸石储氢性能的理论研究



姓名：丁方园

毕业去向：科达节能股份有限公司工作

毕业题目： CO_2 在 La_2O_3 (001)表面的解离

2011年课题组seminars安排

2010-2011学年第二学期工作汇报安排

时间	报告人	汇报内容
3月3日	王丽平, 梁建明, 丁方园	大论文提纲以及小论文目前情况汇报
3月10日	薛金祥, 阎瑞霞, 宋录智, 胡文飞, 解晓东	开题报告
3月17日	宋佳佳, 李静蕊, 孙炫成	假期布置的任务完成情况汇报
3月31日	刘红艳 智翠梅	课题目前进展情况 软件学习情况汇报
4月14日	王丽平, 梁建明, 丁方园	大论文写作进展情况以及存在的问题
4月21日	薛金祥, 阎瑞霞, 宋录智, 胡文飞, 解晓东	近期的课题进展情况以及存在的问题
5月5日	宋佳佳, 李静蕊, 孙炫成	文献阅读情况以及软件学习心得、体会及问题
5月19日	刘红艳, 章日光, 智翠梅	近期工作汇报
6月2日	王丽平, 梁建明, 丁方园	研三同学预答辩
6月16日	宋佳佳, 李静蕊, 孙炫成	这学期各方面的进展以及对课题的了解情况汇报

2011-2012学年第一学期工作汇报安排

时间	报告人	汇报内容
9月8日	薛金祥, 阎瑞霞, 宋录智 胡文飞	假期工作总结及本学期计划安排
9月15日	宋佳佳, 李静蕊, 孙炫成	假期工作总结及本学期计划安排
9月22日	刘红艳, 智翠梅, 解晓东	假期工作总结及本学期计划安排
9月29日	薛金祥, 阎瑞霞, 宋录智 胡文飞, 解晓东	毕业同学小论文完成情况汇报 大论文进度汇报
10月13日	宋佳佳, 李静蕊, 孙炫成 智翠梅	近期工作汇报, 以及预开题报告
10月26日	薛金祥, 阎瑞霞, 宋录智 胡文飞	课题进展情况
11月9日	宋佳佳, 李静蕊, 孙炫成 解晓东	近期工作汇报
11月16日	刘红艳, 章日光, 智翠梅	近期工作汇报
11月30日	薛金祥, 阎瑞霞, 宋录智 胡文飞, 解晓东	大论文提纲汇报
12月7日	宋佳佳, 李静蕊, 孙炫成 研一同学	课题进展状况 研一同学汇报进入研究生学习感受
12月15日	刘红艳, 章日光, 智翠梅	工作总结
12月28日	薛金祥, 阎瑞霞, 宋录智 胡文飞, 解晓东	大论文情况汇报
1月5日	所有同学	假期工作安排

课题组生活缩影



元宵送汤圆



每周例会



章老师
沙湖留念



章书栋
2011.11.22, 章日光
老师喜得贵子



凌老师



吴凌源
2011.07.29, 凌丽霞
老师喜得贵子

课题组生活缩影



银川会议



沙湖之行



送别梁建明



雪中姐妹花



游小太山



羽毛球健将



敬业、求实

协作、创新

- 感谢国家自然科学基金提供项目支持!
- 感谢山西省自然科学基金提供项目支持!
- 感谢课题组各位老师、同学在编写的过程中提供素材、意见和建议!