

## 由分子筛笼内铂羰基簇合物得到的催化剂的分散度研究

李光进 杨亚书 郭燮贤

(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 中国)

市川 胜

(日本北海道大学触媒化学研究中心, 札幌 060 日本)

**摘要** 由分子筛笼内包容的铂羰基簇合物  $[\text{Pt}_{12}(\text{CO})_{24}]^{2-}/\text{NaY}$  和  $[\text{Pt}_9(\text{CO})_{18}]^{2-}/\text{NaY}$  经还原得到的样品  $\text{Pt}_{12}/\text{NaY}$  和  $\text{Pt}_9/\text{NaY}$  的分散度用 EXAFS 和化学吸附进行了表征. 对  $\text{Pt}_{12}/\text{NaY}$  和  $\text{Pt}_9/\text{NaY}$ , EXAFS 分析分别给出  $R_{\text{Pt-Pt}}=2.74\text{\AA}$ , 配位数  $\text{C.N.}=4.2$  和  $R_{\text{Pt-Pt}}=2.74\text{\AA}$ , 配位数  $\text{C.N.}=3.8$ , 而化学吸附结果分别为  $\text{H}/\text{Pt}=1.26$ ,  $\text{CO}/\text{Pt}=0.69$  和  $\text{H}/\text{Pt}=1.24$ ,  $\text{CO}/\text{Pt}=0.64$ . 与浸渍法制备的  $\text{Pt}/\text{Al}_2\text{O}_3$  相比小得多的 Pt-Pt 配位数及大的化学吸附值说明, 由分子筛笼内铂羰基簇合物出发, 我们得到了高分散的 Pt/NaY 催化剂. 由于还原后原子堆积形式的变化,  $\text{Pt}_{12}/\text{NaY}$  和  $\text{Pt}_9/\text{NaY}$  的再还原羰基化不能可逆地得到与前驱体相同的铂羰基簇合物.

**关键词:** 分子筛, 铂, 羰基簇合物, 分散度

直径大约  $20\text{\AA}$  (原子数大约为 400) 的金属颗粒体积被认为是物理和化学性质发生变化的临界体积, 亦即小于  $20\text{\AA}$  的金属颗粒往往表现出不同于体相金属的性质<sup>[1]</sup>. 高分散金属催化剂往往具有特殊的催化性能, 如何制备高分散过渡金属催化剂是一个受到广泛重视的研究课题. 人们尝试把具有一定金属原子数目及结构的金属簇合物负载到载体上以达到制备高分散金属催化剂的目的<sup>[2]</sup>. 但是, 由于在处理及反应过程中金属颗粒的长大及聚集, 要得到高分散的金属负载催化剂实际上是比较困难的.

通过“瓶中造船”(Ship-in-bottle)方法在分子筛(X, Y型)笼内合成的金属簇合物被认为是理想的制备高分散金属催化剂的前驱体, 因为体积足够大的金属簇合物一旦在笼内合成, 在处理或反应过程中就难以移出而形成大颗粒<sup>[3]</sup>. 由笼内羰基簇合物  $\text{Rh}_6(\text{CO})_{16}/\text{NaY}$  和  $\text{Ir}_6(\text{CO})_{16}/\text{NaY}$  出发, 已经被证明可以得到高分散的 Rh, Ir 催化剂<sup>4,5</sup>. 我们曾成功地在 NaY 超笼内合成了铂羰基簇合物  $[\text{Pt}_3(\text{CO})_6]_n^{2-}$  ( $n=3, 4$ )<sup>[6]</sup>. 本文用 EXAFS 及化学吸附方法研究了由笼内 Pt 羰基簇合物还原得到的催化剂的 Pt 金属分散度, 并考查了还原型样品的再还原羰基化性能.

### 1 实验部分

#### 1.1 催化剂制备

笼内 Pt 羰基簇合物  $[\text{Pt}_{12}(\text{CO})_{24}]^{2-}$  和  $[\text{Pt}_9(\text{CO})_{18}]^{2-}$  由  $\text{Pt}^{2+}/\text{NaY}$  和  $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4]^{2+}/\text{NaY}$  经还原羰基化合成<sup>[6]</sup>.  $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4]^{2+}/\text{NaY}$  (4.65wt% Pt) 由 Linde LZY-52 NaY 和

[Pt(NH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>]Cl<sub>2</sub> 的水溶液离子交换法制备, 氧化型 Pt<sup>2+</sup>/NaY 由 [Pt(NH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>]<sup>2+</sup>/NaY 在氧气流下 (120ml·min<sup>-1</sup>), 573K (升温速率 0.5K·min<sup>-1</sup>) 氧化两小时制备. 上两催化剂样品经 623K 氧气流中氧化 2 小时后再在 593K, 氢气流中还原两小时得到相应的还原样品 (分别标记为 Pt<sub>12</sub>/NaY 和 Pt<sub>9</sub>/NaY).

Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(5wt%) 由浸渍法从 H<sub>2</sub>PtCl<sub>6</sub> 和 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 制备, 使用前在 593K, 氢气流中还原 2 小时.

## 1.2 EXAFS 测试

Pt-L<sub>3</sub> 吸收边的 EXAFS(Extended X-ray Absorption Fine Structure) 在日本筑波高能物理研究所电子贮存环的 BL-10B 同步辐射光束线实验装置上用透射法测得. 还原型 EXAFS 薄片样品在 6.67×10<sup>4</sup>Pa 氢气气氛下密封在特殊设计的玻璃样品池内, 窗口由 Kapton 薄膜密封. 铂箔被用作分析 Pt-Pt 配位的参考样品. EXAFS 数据的解析是利用计算机程序“PROGRAM 2”由富里叶变换和曲线拟合方法完成<sup>[7]</sup>.

## 1.3 H<sub>2</sub> 和 CO 化学吸附测试

化学吸附测量在玻璃静态吸附装置上进行. 系统的压力变化由 222AB 型压力传感器测量. 0.2-0.4g 样品被原位还原后在 673K 抽空 1 小时以除去吸附氢. 然后在室温下导入 1.33-10.64kPa 的氢气或一氧化碳得到第一条吸附等温线. 总的化学吸附量由外推到压力为零处的氢气或一氧化碳消耗量而得到. 系统在室温下抽空 5 分钟后再重复前吸附步骤得到第二条吸附等温线以计算弱吸附量.

## 1.4 红外测试

红外样品压成 8mg·cm<sup>-2</sup> 的薄片, 装入 KBr 窗口的石英红外池内, 在岛津 FTIR-4100 双光束红外光谱仪上进行测试.

表 1 不同样品上 Pt-Pt 配位层 EXAFS 拟合结果和 XRD 数据<sup>[6]</sup>  
Table 1 The EXAFS analysis results and XRD data<sup>[6]</sup> for Pt-Pt shells of different samples

samples	shell	EXAFS				XRD
		<i>R</i> /Å	<i>C.N.</i>	$\Delta E_0$ /eV	$\sigma$	<i>R</i> /Å
Pt foil	1	2.76	12	0.23	0.057	2.774
	2	3.91	6	2.13	0.073	3.923
	3	4.80	24	5.04	0.067	4.805
	4					5.548
Pt/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1	2.75	9.6	-2.07	0.062	
	2	3.91	4.1	1.36	0.079	
	3	4.80	14.6	4.29	0.072	
Pt <sub>12</sub> /NaY	1	2.74	4.2	-1.58	0.066	
Pt <sub>9</sub> /NaY	1	2.74	3.8	-2.48	0.063	

\**R*: atomic distances of Pt-Pt; *C.N.*: coordination number;  $\Delta E_0$ : inner potential correction;  $\sigma$ : Debye-Waller factor.

## 2 结果和讨论

### 2.1 EXAFS 谱及其结果分析

为了得到样品中 Pt 金属颗粒的结构信息, 我们测量了 Pt<sub>12</sub>/NaY 和 Pt<sub>9</sub>/NaY 的 EXAFS 谱图. 首先, 我们测量并分析了作为参考样品的铂箔的 EXAFS. 其原始 EXAFS 谱经 *k*<sup>3</sup> 加权后, 波矢量 *k* 范围 3-18Å<sup>-1</sup> 的部分被富里叶变换至 *R* 空间 (如图 1 所示). 富里叶变换谱图上在约 2.6Å (未经相位移校正) 的最强峰被归属为第一配位层 Pt-Pt 键的贡

献, 而位于  $3.8\text{\AA}$ ,  $4.7\text{\AA}$  和  $5.4\text{\AA}$  的峰分别为第二, 第三和第四配位层的 Pt-Pt 键. 相对于不同的 Pt-Pt 配位, 选择合适的窗口通过逆富里叶变换至  $K$  空间, 经曲线拟合分析可以得到不同 Pt-Pt 配位层的原子间距和配位数结果. 对于 Pt 金属的第一, 第二和第三配位层, 我们选择的窗口分别为  $2.0\text{-}3.2\text{\AA}$ ,  $3.5\text{-}4.1\text{\AA}$  和  $4.4\text{-}5.2\text{\AA}$ . 分析结果列于表 1 中. 此结果与体相铂金属的 XRD 晶体衍射结果及其 *fcc* 结构非常一致, 亦即:  $R_1=2.774\text{\AA}$ ,  $R_2=\sqrt{2}R_1=3.923\text{\AA}$ ,  $R_3=\sqrt{3}R_1=4.805\text{\AA}$ <sup>[8]</sup>. 位于第四配位层的铂原子 ( $R_4 = 2R_1$ ) 由于被第一配位层的原子掩蔽而产生多重散射效应, 因此我们使用的基于单散射理论的分析程序不能解析此配位层的数据.

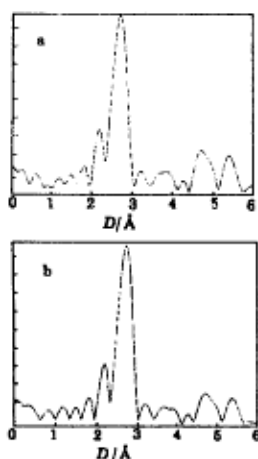


图 1 (a) 铂箔和 (b) Pt/  
Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 的富里叶变换谱  
Fig.1 Fourier transform of  
(a) Pt foil and (b)  
Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

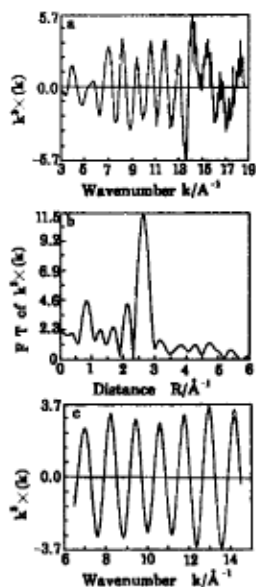


图 2 Pt<sub>12</sub>/NaY 的 EXAFS 谱.  
(a)  $k^3$  加权的 EXAFS 振荡;  
(b) 相应富里叶变换;  
(c) 最近邻 Pt-Pt 配位的曲线拟合 (实线 - 实验结果, 虚线 - 拟合结果)  
Fig.2 EXAFS of Pt<sub>12</sub>/NaY.  
(a)  $k^3$ -weighted EXAFS oscillation;  
(b) Associated Fourier transform;  
(c) Curve-fitting for the first neighbored Pt-Pt coordination. (solid line-experimental, dotted line-calculated)

Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 的富里叶变换图上, 除了位于  $2.6\text{\AA}$  最强峰外, 在高  $R$  区域内归于较远配位层 Pt-Pt 键的几个峰也被观测到了, 说明 Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 样品的铂金属颗粒可能具有较大的粒度. 与铂箔的分析结果类似, Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 样品中 Pt-Pt 配位的分析结果也列于表 1 中. Pt-Pt 不同配位层的原子间距与铂箔的结果相一致, 说明 Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 中的铂金属颗粒可能也具有 *fcc* 结构.

图 2 给出了 Pt<sub>12</sub>/NaY 的 EXAFS 谱图, 亦即: (a)  $k^3$  加权的 EXAFS 函数  $k^3\chi(k)$ ; (b)  $k$  范围在  $5\text{-}15.5\text{\AA}^{-1}$  的富里叶变换和 (c) 第一配位层 Pt-Pt 配位的曲线拟合. 图 2b 所示的 Pt<sub>12</sub>/NaY 的富里叶变换图中, 大约  $2.6\text{\AA}$  (未经相位移校正) 的强峰归于最近邻的 Pt-Pt 配位. 与铂箔及 Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 对照, 在高  $R$  区域内没有峰出现, 说明 Pt<sub>12</sub>/NaY 样品中铂金属颗粒大小以至于高配位层的 Pt-Pt 贡献很弱. 在  $2.2\text{\AA}$  处有一较强峰出现, 在铂箔和 Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 两样品中此类峰也曾被观测到, 此峰的出现是由于 Pt-Pt 键相位移函数的非线性引起的<sup>[9]</sup>, 此类峰对于过渡金属特别是 VIII B 族金属 (Os, Ir, Pt) 的小颗粒比较明显<sup>[10]</sup>. 值得注意的是, 由于我们在样品制备过程中应用了汞柱压力计, 致使样品上或多或少存在汞的污染, 造成 EXAFS 振荡 (图 b) 在  $13.7\text{\AA}^{-1}$  处急剧增强及富里叶变换图上小于  $1.0\text{\AA}$  的较强峰出现.

把富里叶变换图中的  $2.0\text{-}3.2\text{\AA}$  部分作为分析 Pt-Pt 配位的窗口, 用逆富里叶变换和曲线拟合方法得到 Pt-Pt 配位结果, Pt<sub>12</sub>/NaY 和 Pt<sub>9</sub>/NaY 的 EXAFS 分析结果也列于

表 1 中. 此两样品的 Pt-Pt 最近邻距离与铂箔及 Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 结果一致, 而配位数 (4.2 和 3.8) 则小得多, 也表明 NaY 内形成的铂金属颗粒体积很小. 按照铂金属颗粒中的原子以面心立方紧密堆积的模型<sup>[11]</sup>, 我们可以估计平均配位数为 4 的金属颗粒的原子数大约为 10, 这与其前驱体簇合物中的原子数 (12 或 9) 相近似. 还原后的铂羰基簇合物有可能保持其前体簇合物中的原子数目. 而 Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 中的铂原子数要在 100 以上.

## 2.2 化学吸附

表 2 给出样品 Pt<sub>12</sub>/NaY, Pt<sub>9</sub>/NaY 和 Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 上 H<sub>2</sub> 和 CO 化学吸附结果. 图 3 是 Pt<sub>12</sub>/NaY 上 H<sub>2</sub> 和 CO 化学吸附等温线. 化学吸附量由外推到压力为零处的 H<sub>2</sub> 或 CO 消耗量而定. 如文献所述<sup>[4]</sup>, 由于 H<sub>2</sub> 的物理吸附可以忽略, 我们取第一条吸附等温线的结果作为强的化学吸附量, 而认为第一次吸附后室温抽空 5 分钟再吸附得到的第二条吸附等温线的氢吸附量作为弱化学吸附. 对 CO 的化学吸附而言, 我们取两条吸附等温线之差作为 CO 的化学吸附量.

Pt<sub>9</sub>/NaY 和 Pt<sub>12</sub>/NaY 上氢吸附分别给出大于 1.2 的 H<sub>ads</sub>/Pt 比值, 表明样品中所有铂原子都是吸附质分子可及的, 支持了 EXAFS 给出的铂在这两个样品上高分散的结论. CO 的化学吸附给出 CO<sub>ads</sub>/Pt=0.6-0.7, 这也与高分散铂催化剂上的化学吸附相一致<sup>[12]</sup>. 由于 CO 以两种形式——线式和桥式吸附在 Pt 上, 所以即使对于 100% 分散的金属颗粒, CO<sub>ads</sub>/Pt 也小于 1.0. Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 的化学吸附结果为 H<sub>ads</sub>/Pt=0.36, CO<sub>ads</sub>/Pt=0.18, 表明此样品中铂金属颗粒要大得多, 与 EXAFS 结果相一致. 曾有报导在金属颗粒 6-13Å 的 Pt/NaY 催化剂样品上, H<sub>ads</sub>/Pt=1 和 CO<sub>ads</sub>/Pt=0.41-0.56<sup>[12]</sup>.

## 2.3 Pt<sub>12</sub>/NaY 和 Pt<sub>9</sub>/NaY 的再还原羰基化

还原型 Pt<sub>12</sub>/NaY 的再还原羰基化的原位红外谱图如图 4 所示. 室温下导入 6.67×10<sup>4</sup>Pa CO, 在线式羰基区内出现 2108, 2078cm<sup>-1</sup> 两谱带, 而同时在桥式羰基区内出现一较强吸收谱带 1829cm<sup>-1</sup>. 这与一般负载铂催化剂上 CO 吸附结果不同, 一般在负载 Pt 催化剂上, CO 以线式吸附为主, 桥式吸收谱带弱且宽<sup>[13]</sup>. 随着温度的升高, 桥式和线式吸收谱带的强度逐渐增强, 353K, 30 分钟后, 桥式羰基谱带移到 1843cm<sup>-1</sup>, 样品的颜色也变为绿色. Pt<sub>9</sub>/NaY 在 CO 中的还原羰基化也给出一绿色样品, 其红外羰基谱带为 2104, 2090 和 1860cm<sup>-1</sup>.

表 2 不同催化剂上 H<sub>2</sub> 和 CO 化学吸附结果  
Table 2 Chemisorption results of H<sub>2</sub> and CO on different catalysts

samples	H/Pt			CO/Pt		
	A	B	A-B	A	B	A-B
Pt <sub>12</sub> /NaY	1.26	0.37	0.89	0.74	0.05	0.69
Pt <sub>9</sub> /NaY	1.24	0.34	0.09	0.68	0.04	0.64
Pt/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.36	0.10	0.26	0.20	0.02	0.18

\*A: the first adsorption isotherm measured at room temperature;

B: the second adsorption isotherm measured after A. (The sample was evacuated for 5 min at room temperature before measurement.)

CO 与金属小颗粒反应可以形成金属羰基簇合物<sup>[4,14]</sup>. 由 Pt<sub>12</sub>/NaY 和 Pt<sub>9</sub>/NaY 与 CO 反应得到的绿色铂羰基物种可被归属为 NaY 内的 Pt 羰基簇合物 (分别标记为 Pt<sub>12</sub>(CO)<sub>z</sub>/NaY 和 Pt<sub>9</sub>(CO)<sub>y</sub>/NaY). 不同于还原前母体簇合物的红外谱图, 说明 Pt<sub>12</sub>(CO)<sub>z</sub> 和 Pt<sub>9</sub>(CO)<sub>y</sub> 具有不同于母体的结构. 实际上, [Pt<sub>3</sub>(CO)<sub>6</sub>]<sup>2-</sup> 簇合物中铂金属的扭曲三角柱型骨架结构不是能量上最有利的构型. 经还原后, 随着配位羰基的消失, 铂金属簇合物

有可能从原来的三角柱型骨架结构变成能量上更有利的紧密堆积形式, 如面心立方或二十面体构型. 即使再进行还原羧基化也不可能使铂金属簇合物恢复原来的三角柱构型. 这与分子筛笼内的 Rh<sup>[4]</sup> 和 Ir<sup>[5]</sup> 羧基簇合物不同, 两者还原样品的再羧基化都能可逆地得到与还原前母体相同的金属簇合物, 这可能与 Rh<sub>6</sub>(CO)<sub>16</sub> 及 Ir<sub>6</sub>(CO)<sub>16</sub> 羧基簇合物的正八面体骨架结构的稳定性有关.

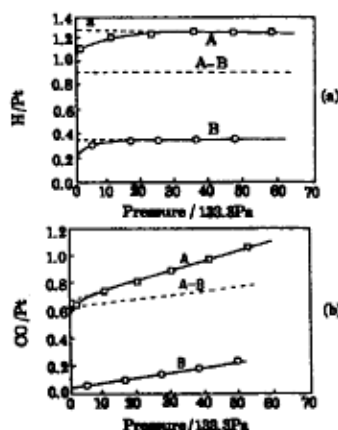


图3 Pt<sub>12</sub>/NaY 上 (a) H<sub>2</sub> (b) CO 的  
吸附等温线  
Fig.3 Adsorption isotherms of (a)  
H<sub>2</sub> and (b) CO on Pt<sub>12</sub>/NaY

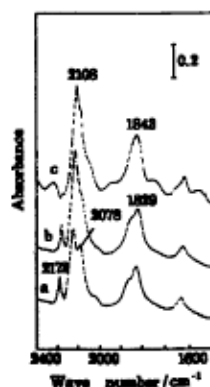


图4 Pt<sub>12</sub>/NaY 在  $6.67 \times 10^4$  Pa CO  
中的红外谱图 (差谱)  
Fig.4 Infrared spectra (difference  
spectra) of Pt<sub>12</sub>/NaY in  
 $6.67 \times 10^4$  Pa CO  
(a) 298K, 30min; (b) 298K, 30min;  
(c) 353K, 30min

综上所述, 在由 [Pt<sub>12</sub>(CO)<sub>24</sub>]<sup>2-</sup>/NaY 和 [Pt<sub>9</sub>(CO)<sub>18</sub>]<sup>2-</sup>/NaY 还原制备 Pt<sub>12</sub>/NaY 和 Pt<sub>9</sub>/NaY 的过程中, 由于分子筛的孔道效应及其与表面的相互作用, 铂金属颗粒不容易聚集成大颗粒. 还原后的样品可能保持了其前驱体中的金属原子数而获得了高分散的催化剂. 由于原子堆积形式的变化, 还原后样品的再还原羧基化不能可逆地得到与其前驱体相同的羧基簇合物物种.

#### 参 考 文 献

- 1 Davis S C, Klabunde K J. *Chem. Rev.*, 1982, 82:153
- 2 Basset J M, Wyman R. *Surface Organometallic Chemistry: Molecular Approaches to Surface Catalysis*, London: Kluwer Academic Publishers, 1988
- 3 Ichikawa M. *Tailored Metal Catalysts*, ed. Iwasawa I, Reidel: Dordrecht, 1986, 183.
- 4 Rao L F, Fukuoka A, Kosugi N, et al. *J. Phys. Chem.*, 1990, 94:5317
- 5 Kawi S, Gates B C. *Cata. Lett.*, 1991, 10:23
- 6 Li G J, Fujimoto T, Ichikawa M, et al. *Catal. Lett.*, 1992, 12:171; *JCS Chem Commun.*, 1991, 1337
- 7 Kosugi N, Kuroda H. Program EXAFS/v03, Research Center for Spectrochemistry, The University of Tokyo, 1987
- 8 CRC Handbook of Chemistry and Physics, 56th Ed., Cleveland: CRC Press, 1975, B202
- 9 Teo B K, Lee P A. *J. Am. Chem. Soc.*, 1979, 101:2815
- 10 Marques E C, et al. *J. Chem. Phys.*, 1982, 77:1027
- 11 Kampers F W H, et al. *J. Surf. Sci.*, 1979, 81:631
- 12 Gallezot P, et al. *J. Catal.*, 1975, 39:334

- 13 Primet M, De Menorval L C, Fraissard J, et al. *J. Chem. Soc. Faraday Trans. 1*, 1985, 81:2867  
14 Sheu L L, Knozinger H, Sachtler W M H. *Catal. Lett.*, 1989, 2:129

### Dispersion of Catalysts Derived from Intrazeolite Pt Carbonyl Clusters

Li Guangjin Yang Yashu Guo Xiexian

(State Key Laboratory of Catalysis, Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Dalian 116023, China)

Ichikawa Masaru

(Catalysis Research Center, Hokkaido University, Sapporo 060, Japan)

**Abstract** The catalysts derived from the reduction of intrazeolite Pt carbonyl clusters  $[Pt_{12}(CO)_{24}]^{2-}/NaY$  and  $[Pt_9(CO)_{18}]^{2-}/NaY$  were characterized by EXAFS and chemisorption techniques. EXAFS analysis gave  $R_{Pt-Pt}=2.74\text{\AA}$ ,  $C.N.=4.2$  for  $Pt_{12}/NaY$  and  $R_{Pt-Pt}=2.74\text{\AA}$ ,  $C.N.=3.8$  for  $Pt_9/NaY$ , while the chemisorption of  $H_2$  and CO gave  $H/Pt=1.26$ ,  $CO/Pt=0.69$  and  $H/Pt=1.24$ ,  $CO/Pt=0.64$  for  $Pt_{12}/NaY$  and  $Pt_9/NaY$  respectively. Compared with the results of  $Pt/Al_2O_3$ , it is concluded that highly dispersed  $Pt/NaY$  catalysts were derived from the intrazeolite Pt carbonyl clusters. Because of the structural changes of reduced Pt carbonyl clusters, the recarbonylation of  $Pt_{12}/NaY$  and  $Pt_9/NaY$  can not regenerate the same Pt carbonyl clusters as their precursors.

**Keywords:** Zeolites, Pt, Carbonyl clusters, Dispersion

---

## 书 讯

由国家自然科学基金委员会组织编写的《自然科学发展战略研究报告》之一的“物理化学发展战略研究报告”，已通过专家评审鉴定和编辑委员会审定，将于1994年第三季末由科学出版社出版。定价约人民币10元。

本书是众多物理化学工作者及管理人员在广泛调查研究，充分掌握物理化学学科发展前沿，结合我国国情经过认真分析研究后提出的。它阐述了物理化学的战略地位；论述了国内外物理化学整体发展的趋势和前沿；详细分析了物理化学主要分支学科发展的状况；提出了我国物理化学近、中期战略目标；优先发展领域和措施建议；并附有我国物理化学有关情况的资料。它将对自然科学基金的申请、评审、研究成果的评定等起重要指导作用。

本书可供物理化学及其有关方面的科技领导干部、科技管理人员和科技工作者阅读，亦可供大专院校有关专业师生参考。