

## Chinese Abstracts (中文摘要)

## 不同温度下二氧化硅纳米管的结构和振动性质的分子动力学模拟...

张胜利<sup>a</sup>, 张永红<sup>b\*</sup>, 黄世萍<sup>a\*</sup>, 王鹏<sup>c</sup>, 田辉平<sup>c</sup> (a. 北京化工大学纳米材料教育部重点实验室, 北京 100029; b. 天津工业大学物理系, 天津 300160; c. 中国石油化工股份有限公司石油化工科学研究院, 北京 100083)

**摘要:** 采用三种势能模型, 利用分子动力学模拟研究了在300~1600 K内4、6和8元环的二氧化硅纳米管. 结果表明, 三种纳米管的末端环的稳定性随温度的升高而降低. 通过振动态密度考察了二氧化硅纳米管的有效振动特性. 以及不同温度下二氧化硅纳米管的红外光谱.

**关键词:** 二氧化硅纳米管, 分子动力学, 结构性质, 振动态密度红外光谱

## 分子动力学模拟研究DMSO-水体系的结构和相互作用..... 504

张荣<sup>\*</sup>, 吴文娟 (广东药学院药科学院物理化学教研室, 广州 510006)

**摘要:** 用分子动力学模拟方法结合核磁共振化学位移和红外光谱结果, 研究二甲基亚砜DMSO水溶液在全浓度范围内的结构和弱相互作用. 表明径向分布函数分析, DMSO水溶液中既存在着传统的强氢键又存在C-H...O弱相互作用. 氢键网络分析发现DMSO水溶液体系在水富集区域, 水分子倾向于自身缔合形成稳定的分子簇结构, 而随着DMSO浓度的逐渐增加, 水的有序结构受到破坏. DMSO的摩尔分数为0.35是一个特殊点, 多种性质偏离理想混合最远. 水分子和DMSO分子发生了交叉缔合作用形成稳定的分子聚集体. 分子动力学统计的平均氢键数与核磁共振化学位移和红外波数变化数据结果进行比较, 结果吻合很好.

**关键词:** 全原子模拟, 化学位移, 红外波数, DMSO水溶液, 氢键

阈值光电子-光离子符合成像研究NO<sup>+</sup> c<sup>3</sup>Π(v'=0)态解离动力学...

孙金大<sup>a</sup>, 单晓斌<sup>a</sup>, 刘付轶<sup>a</sup>, 盛六四<sup>a\*</sup>, 唐小锋<sup>b</sup>, 牛铭铂<sup>b</sup>, 宋磊<sup>b</sup>, 周晓国<sup>b</sup>, 刘世林<sup>b</sup> (a. 中国科学技术大学国家同步辐射实验室, 核科学技术学院, 合肥 230029; b. 中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室, 化学物理系, 合肥 230026)

**摘要:** 用阈值光电子-光离子符合成像方法研究了处于c<sup>3</sup>Π(v'=0)态的NO<sup>+</sup>的光解离. 在使用垂直分子束的情况下, 近似矢量加法规则推导了碎片离子在质心坐标系和最小几质心坐标系中的速度, 飞行时间和在速度图像中的位移之间关系. 得到并讨论了N<sup>+</sup>碎片离子在质心坐标系中速度及在最可几质心坐标系中的速度和角度分布.

**关键词:** 阈值光电子-光离子符合成像, 速度成像, 一氧化氮, 释放动能, 角度分布

## 不相容系统中酸碱中和反应驱动动力学的非线性不稳定性..... 513

Asad Ahemd, 杨雅辉, 柴川, 吴江涛\* (西安交通大学动力工程及多相流国家重点实验室, 西安 710049)

**摘要:** 采用含Mach-Zehnder干涉光路和Hele-Shaw反应器的实验系统, 研究了重力场作用下, 在Hele-Shaw系统内沿水平界面发生的由酸碱中和反应驱动的动力学不稳定性. 反应器内包含上下两层反应物, 即下层密度较大的四甲基氧化铵水溶液和上层密度较小的溶解于有机相的丙酸溶液. 研究了在伴随有界面传质的中和反应过程中, 化学组分对于动力学不稳定性影响. 观察发现了由于反应物初始浓度不均引起的多种形式的Marangoni对流结构, 包含有胞状结构和各种震动波形式的结构. 测量了不稳定性发生过程中碱溶液的浓度. 结果表明不稳定性对流的产生可以显著提高系统内的传质效率, 并造成传质结构的剧烈变形.

**关键词:** 流体动力学, 对流输运, 扩散, 界面, 传质, 化学反应器

碰撞能对O<sup>+</sup>+DH(v=0, j=0)→OD<sup>+</sup>+H的准经典轨线..... 521

孙海竹, 刘新国\*, 吕娟娟, 刘会荣 (山东师范大学物理与电子科学学院, 济南 250014)

**摘要:** 运用准经典轨线的方法, 基于RODRIGO势能面, 研究反应体系O<sup>+</sup>+DH(v=0, j=0)→OD<sup>+</sup>+H的立体动力学性质. 对描述k·j'两矢量相关和k·k'-j'三矢量相关的分布函数P(θ<sub>r</sub>)和P(φ<sub>r</sub>)以及产物转动取向参数进行了详细的讨论, 发现极化微分反应截面呈现有趣的现象. 计算了反应几率与反应截面. O<sup>+</sup>+DH(v=0, j=0)→OD<sup>+</sup>+H反应的立体动力学性质对体系的碰撞能非常敏感.

**关键词:** 立体动力学, 准经典轨线方法, 极化微分反应截面

## 镓掺杂氧化锌和硫化锌电子结构差异的第一性原理..... 527

李平<sup>a\*</sup>, 邓胜华<sup>b</sup>, 张莉<sup>a</sup>, 李义宝<sup>a</sup>, 余江应<sup>a</sup>, 刘东<sup>a</sup> (a. 安徽建筑

工业学院数理系, 合肥 230022; b. 北京航空航天大学物理科学与核能工程学院, 北京 100191)

**摘要:** 运用第一性原理进行了相关计算研究Ga掺杂的ZnO和ZnS的电子结构的差异. 结果表明, LDA和LDA+U计算的结果在定性上是一致的. 掺杂Ga以后, ZnO和ZnS的费米能级处均出现杂质态. 掺杂中的ZnO, 杂质态在导带是离域的. 掺杂后的ZnS, 虽然p态比较离域, 但其s态在费米能级处却是局域的. 前线轨道的电荷密度分布也给出了相同的信息. 交换ZnO和ZnS的晶格结构, 结果不变. 局域化的Ga-s态是导致掺杂ZnS电学性能差的原因.

**关键词:** 第一性原理, 氧化锌, 硫化锌, 掺杂

## 二甲基亚甲基硅烯与乙烯生成硅杂双环化合物反应机理的从头算研究..... 533

卢秀慧\*, 韩军锋, 于海彬, 廉贞霞 (济南大学化学化工学院, 济南 250022)

**摘要:** 用CCSD(T)//MP2/6-31G\*方法研究了单重态二甲基亚甲基硅烯与乙烯生成硅杂双环化合物环加成反应的机理, 根据该反应的势能面可以预言, 该反应只有一条主反应通道. 该主反应通道所呈现的反应规律为: 二甲基亚甲基硅烯中Si原子的3p空轨道与乙烯中的π轨道形成了π→p授受键, 生成三元环中间体(INT1); 扩环作用使INT1异构化为四元环硅烯(P2); P2中Si原子的sp<sup>3</sup>杂化使P2进一步与乙烯结合生成了硅杂双环化合物.

**关键词:** 二甲基亚甲基硅烯, 反应机理, 势能面

## 密度泛函理论研究碱金属原子在完美氧化镁(001)表面的吸附.. 538

徐闰<sup>a\*</sup>, 贡伟明<sup>a</sup>, 张旭<sup>a</sup>, 王林军<sup>a</sup>, 洪峰<sup>b</sup> (a. 上海大学材料科学与工程学院, 上海 200072; b. 上海大学物理系, 上海 200444)

**摘要:** 基于平面波赝势法的密度泛函理论系统地研究了孤立碱金属原子(锂、钠、钾、铷、铯)在完美氧化镁(001)表面的吸附. 锂在氧位表面上的吸附能是0.72 eV, 大约是其它碱金属的3倍. 锂和表面氧之间较强的相互作用主要是来源于共价键的作用, 这可由态密度和差分电荷密度的分析所证实. 讨论碱金属在MgO(001)表面吸附的成键机理.

**关键词:** 碱金属原子, 吸附, 密度泛函理论

## 钡电极活性表面积的计算..... 543

方兰兰, 陶骞, 李明芳, 廖玲文, 陈栋, 陈艳霞\* (中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室, 化学物理系, 合肥 230026)

**摘要:** 通过测量双电层电容、氧化物还原、欠电位沉积铜和一氧化碳脱附的电量四种方法估算了多晶钡电极的活性表面积. 结果表明, 使用第二和第三种方法计算得到的钡电极活性表面积有较好的一致性, 误差小于5%, 为了使另外两种方法计算得到的面积与之相近, 推断单位面积双电层电容双电层电容为23.1±0.4 μF/cm<sup>2</sup>, 饱和吸附一氧化碳的覆盖度大约为0.66 ML, 讨论了使用这些方法在确定多晶钡电极活性面积时的关键步骤及适用性.

**关键词:** 多晶钡电极, 活性表面积, 双电层电容, 氧吸附, 欠电位沉积, 一氧化碳脱附

Ar<sub>2</sub>-Ne聚合物的三维势能面和束缚态..... 549

牛梅, 许小涛, 陈侠, 胡小龙, 凤尔银\* (安徽师范大学物理系, 芜湖 241000)

**摘要:** 使用单双激发并对三重激发作微扰处理的耦合簇方法计算了Ar<sub>2</sub>-Ne聚合物的三维势能面. 使用的基组是aug-cc-pVqz并包括3s3p2d2f1g中点键函数. 用二维模型势对7个Ar<sub>2</sub>键长值的每一个对应的二维格点(R, θ)上的能量进行了拟合. 再将7个二维模型势通过对(r-r<sub>e</sub>)的六次多项式内插得到三维势能面, 并用于随后的振转能级计算, 所得到的跃迁频率、光谱常数等与相应的实验结果进行了比较.

**关键词:** Ar<sub>2</sub>-Ne, 聚合物, 势能面, 转动光谱

## 封装钠的硼氮纳米管在垂直构型下场发射的第一性原理研究..... 553

高强, 胡双林, 李斌\* (中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室, 合肥 230026)

**摘要:** 采用密度泛函形式化的自洽方法模拟了纯的硼氮纳米管和封装钠的硼氮纳米管在垂直于管轴的电场作用下的场发射. 发现硼氮纳米管封装钠之后的近自由电子态参与场发射并表现出很强的发射特性. 通过分析场发射总能量分布曲线的特征, 探索近自由电子态对于场发射的作用和场发射电流对于外电场的响应. 发现在垂直管轴的发射构型下, 场发射具有很灵敏的电场响应度, 这是与硼氮纳米管中近自由电子态的特殊分布取向有关.

**关键词:** 场发射, 硼氮纳米管, 近自由电子态, 响应

**4'-(对-胺苯基)-2,2':6',2''-三联吡啶光物理性质** ..... 558  
宋朋<sup>a</sup>, 孙士国<sup>b</sup>, 周潘旺<sup>a</sup>, 刘建勇<sup>a\*</sup>, 徐勇前<sup>b</sup>, 彭孝军<sup>b</sup> (a. 中国科学院大连化学物理研究所分子反应动力学国家重点实验室, 大连 116023; b. 大连理工大学精细化工国家重点实验室, 大连 116012)

**摘要:** 用稳态吸收和荧光光谱技术研究4'-(对-胺苯基)取代的三联吡啶配体(APT)分子在不同极性溶剂中的光谱和光物理性质. 在极性溶剂中APT分子存在着双荧光现象, 它分别对应于局域激发态和分子内电荷转移态. APT分子的胺基N原子与醇类溶剂之间的氢键作用使该分子在质子性与非质子性溶剂中具有不同的线性关系. 此外, APT分子的三联吡啶部分与锌离子络合以及三联吡啶N4-N8-N14与甲醇分子形成氢键后, 在低能区域出现新的吸收光谱带与荧光光谱带, 表明在基态和激发态均形成了新的络合物. 时间分辨单光子计数技术测量的APT分子的荧光衰减过程, 证明了APT分子的分子内电荷转移机制符合“两态”模型.

**关键词:** 双荧光, 局域激发态, 分子内电荷转移, 三联吡啶, 复合物, 荧光衰减

**SnPc在Ag(111)表面吸附特性的第一性原理研究** ..... 565  
范慧丽<sup>a</sup>, 类淑来<sup>a</sup>, 黄静<sup>b</sup>, 李群祥<sup>a\*</sup> (a. 中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室, 合肥 230026; b. 安徽建筑工业学院材料与化工学院, 合肥 230022)

**摘要:** 采用第一性原理研究了SnPc分子在Ag(111)表面的吸附构型和电子结构. Sn-up和Sn-down两种优化的吸附构型与实验测量结果非常吻合, SnPc以Sn-down构型吸附在Ag(111)表面显得更稳定. Sn原子在两种吸附构型之间转换所需要能量与转换方向有关, 由Sn-up向Sn-down构型转换时需翻越一个1.68 eV的能垒, 反之需要2.17 eV. 扫描隧道显微镜理论模拟图像给出实验观测结果的主要特征, Sn-up分子的中心处为一个亮斑, 而Sn-down分子中心为一个空洞. 计算结果验证了实验提出的Sn原子吸附位置的转换机理.

**关键词:** SnPc, 表面吸附, STM图像, 吸附构型转换, 第一性原理

**Ba+HI→BaI+H反应的准经典轨迹研究** ..... 570  
V. N. Atasi<sup>e</sup> (尼日利亚Bells理工大学化学科学部, 奥贵州)

**摘要:** 采用准经典轨迹的方法在扩展的London-Eyring-Polanyi-Sato势能面上对Ba+HI→BaI+H反应研究. 计算了产物BaI的转动、振动、平移和角分布, 计算结果与反应值一致.

**关键词:** 准经典轨迹计算, 扩展的London-Eyring-Polanyi-Sato势能面, Ba+HI反应

**四-(叔丁基)-四氮杂卟啉金属配合物的振动光谱和DFT计算** .. 573  
卢同同, 高慧玲, 何天敬, 刘凡镇, 陈东明\* (中国科学技术大学化学物理系, 合肥 230026)

**摘要:** 测量了四-(叔丁基)-四氮杂卟啉金属配合物(MT(*t*Bu)TAP, M=Cu, Co, Ni, Zn)的拉曼和红外光谱. 在B3LYP理论水平上计算了其基态结构和振动光谱, 基于计算结果对观察到的拉曼谱带进行了详细的指认. 考察了拉曼和红外谱带频率变化与四氮杂卟啉环结构的关系. 随着环内核尺寸的减小, C<sub>β</sub>C'β 伸缩振动(A<sub>g</sub>)、C<sub>α</sub>N<sub>m</sub>反对称伸缩振动(A<sub>g</sub>)、以及C<sub>α</sub>N<sub>m</sub>对称伸缩振动(B<sub>g</sub>)的频率线性地增加, 其中后两者对环内核尺寸的变化更为敏感.

**关键词:** 四氮杂卟啉, 拉曼光谱, 分子振动, DFT

**不同[Cu]/[In]比例的CuInS<sub>2</sub>薄膜的特性** ..... 582  
Mutlu Kundakçı (土耳其阿塔图尔克大学理学院物理系, 埃尔祖鲁姆)

**摘要:** 采用连续离子层吸附与反应方法在玻璃基板上按照不同[Cu]/[In]的比例制备了CuInS<sub>2</sub>薄膜, 并在400 °C退火30 min. 对薄膜的晶体结构和晶粒尺寸用X射线衍射方法进行了表征, 原子力显微镜测定薄膜的表面形貌. 研究不同的[Cu]/[In]比例对薄膜光学和电学性能的影响. 采用直流两探针法在300~470 °C测定CuInS<sub>2</sub>薄膜的电阻率, 随着[Cu]/[In]比例的增加, 电阻率值越来越低. 溶液中[Cu]/[In]的比例明显影响CuInS<sub>2</sub>薄膜的结构、电学和光学特性.

**关键词:** 薄膜, 连续离子层吸附与反应方法, 黄铜矿类化合物

**通过氧化物前驱体非真空方法制备高质量CuInSe<sub>2</sub>薄膜** ..... 587  
蒋帅, 江国顺, 刘伟峰, 朱长飞\* (中国科学技术大学材料科学与工程系, 中国科学院能量转化材料重点实验室, 合肥 230026)

**摘要:** 通过非真空工艺利用CuO、In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>混合氧化物制备CuInSe<sub>2</sub>薄膜太阳能电池中的吸收层CuInSe<sub>2</sub>薄膜. 利用柠檬酸法制备出粒径在100 nm以下的CuO、In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>混合氧化物纳米粉, 在浆料中加入过量的硒, 用来创造非平衡的反应条件促进氧化物的还原和硒化. 考察了影响硒化的几个反应条件, 最优的硒化条件为1.9 kPa的Se蒸汽压中, 550 °C硒化60 min.

**关键词:** 薄膜, CuInSe<sub>2</sub>, 非真空, 纳米颗粒

**Al<sup>3+</sup>掺杂的CuZn铁氧体的结构, 电学和磁学特性** ..... 591  
S. M. Ramay<sup>a</sup>, Saadat A. Siddiqi<sup>a</sup>, S. Atiq<sup>b\*</sup>, M. S. Awan<sup>c</sup>, S. Riaz<sup>a</sup> (a. 巴基斯坦旁遮普邦大学固态物理中心, 拉合尔 54590; b. 巴基斯坦拉合尔管理与科学大学科学与工程学院, 拉合尔 54972; c. 巴基斯坦COMSATS信息职业技术学院, 伊斯兰堡)

**摘要:** 采用固相合成反应技术制备纳米Cu<sub>0.5</sub>Zn<sub>0.5</sub>Fe<sub>2-x</sub>Al<sub>x</sub>O<sub>2</sub> (x=0.0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4和0.5)铁氧体材料, 研究Al<sup>3+</sup>含量对结构, 电学和磁学性质的影响. 采用X射线衍射研究单相立方尖晶石结构. 利用Scherrer公式估算晶粒尺寸. 测定了温度依赖的直流电阻率. 结果表明随Al<sup>3+</sup>含量的增加, 晶格常数减小, 孔隙度增加, 饱和磁化强度值降低, Al<sup>3+</sup>对铁氧体的介电常数、介电损耗角的正切值和介电损耗因子等介电性能有明显影响, 这可能与空间电荷极化有关.

**关键词:** 氧化材料, 铁氧体, 固相反应, 电阻率, 介电常数

**树枝状银纳米结构的可控电化学合成及其SPR/SERS性质** .... 596  
洪勋, 王冠中\*, 王颖, 祝巍, 沈小双 (中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室, 物理系, 合肥 230026)

**摘要:** 采用电化学沉积的方法在导电玻璃衬底上合成出树枝状的银纳米结构. 通过调控电位、表面活性剂、硝酸银浓度等参数控制树枝状银纳米结构的尺寸、直径、结晶性和分枝密度. 三种典型的树枝状银纳米结构被用来做表面增强拉曼散射衬底, 其中的一种可以清楚的探测浓度低于0.1 nmol/L的若丹明6G分子. 不同树枝状银纳米结构表面增强拉曼效果相差比较大, 说明了分枝颗粒形状, 特别是颗粒间距对表面增强拉曼散射有非常重要的影响.

**关键词:** 银, 树枝状纳米结构, 电沉积, 表面增强拉曼散射

**聚吡咯-钛酸钡复合材料的制备和吸波性能** ..... 603  
李巧玲\*, 张存瑞, 李建强 (中北大学理学院化学系, 太原 030051)

**摘要:** 通过化学氧化法在乳液聚合体系中合成了聚吡咯. 然后以脱脂棉作为模板使用溶胶-凝胶法合成了钛酸钡微带. 以合成的两种材料作为基体按不同的比例制备了聚吡咯-钛酸钡复合材料. 复合材料的结构形貌和性能通过红外、X射线衍射、扫描电镜以及网络分析仪检测. 使用PNA3629D网络分析仪测定复合材料在S和C波段的复数介电常数和微波损耗. 研究了钛酸钡和聚吡咯的质量比对复合材料吸波性能的影响. 提出了聚吡咯-钛酸钡复合材料的吸波机理.

**关键词:** 钛酸钡, 聚吡咯, 吸波性能

**球状纳米系统高能级斯塔克效应和谱线** ..... 608  
吴强<sup>a\*</sup>, 龙晓霞<sup>a</sup>, 郑瑞伦<sup>b</sup> (a. 重庆文理学院电子电气工程学院, 重庆 402160; b. 西南大学物理科学与技术学院, 重庆 400715)

**摘要:** 以三层CdS/HgS/CdS球状纳米系统为例, 研究了在电场和层间作用下球状纳米系统高能级斯塔克效应的能级分裂规律以及谱线的频率、强度和自发辐射系数的线度效应. 结果表明, 系统的斯塔克效应只有在只有电场时, 能级是按1, 3, ..., (2n-1)的规律进行分裂, 与氢原子类似; 有电场和层间同时作用时, 能级是按1, 4, ..., n<sup>2</sup>的规律进行分裂. 量子跃迁时各谱线的频率均随系统线度增大而减小, 除少数谱线外, 多数谱线的强度随线度增大而减小, 而自发辐射系数随线度增大而增大; 电场会引起谱线的频率发生改变, 其谱线频移量与电场强度的平方成正比; 除少数谱线外, 电场和层间作用引起的谱线频移量均随线度增大而减小; 层间作用会使电子的能级稍有降低, 稍微增大谱线的强度和自发辐射系数值, 但它不会影响谱线的频率、强度和自发辐射系数随线度的变化趋势, 在线度较小时层间作用的影响才显著.

**关键词:** 层间作用, 三层球状纳米系统, 斯塔克效应, 谱线频移, 自发辐射系数

**纳米结构锌及锌氧化物薄膜对甲基橙的降解作用研究** ..... 615  
吴炳俊<sup>a,b</sup>, 郝常山<sup>a</sup>, 谢斌<sup>a</sup>, 李明<sup>a\*</sup> (a. 中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室, USTC-SHINCRON联合实验室, 合肥 230026; b. 天津津航技术物理研究院, 天津市薄膜光学重点实验室, 天津 300192)

**摘要:** 采用磁控溅射方法制备了纳米金属锌薄膜, 结合后续的空气退火处理制备了纳米锌氧化物薄膜. 金属锌薄膜对甲基橙的还原降解以及锌氧化物薄膜对甲基橙的光催化降解过程都可以用一级反应动力学方程来描述. 甲基橙溶液在金属锌膜的还原降解下具有最快的褪色速率, 但矿化不完全; 在紫外光波段出现的额外吸收峰表明生成了芳香族中间产物. 完全氧化的氧化锌薄膜对甲基橙的光催化降解速率仅为金属锌膜还原降解速率的1/4左右, 没有出现芳香族中间产物. 另外实验发现部分氧化的锌氧化物薄膜对甲基橙的光催化降解速率明显高于完全氧化的氧化锌薄膜, 光催化活性的提高可能由于部分氧化薄膜中同时存在的金属锌及氧化锌相之间的协同效应.

**关键词:** 甲基橙, 锌, 锌氧化物, 氧化锌, 还原降解, 光催化