

## Chinese Abstracts (中文摘要)

**硫脲 $2^1A$ 激发态扭曲几何结构的共振拉曼光谱和理论研究** ..... 1  
张海波, 赵彦英, 郑旭明\* (浙江理工大学化学系, 先进纺织材料与加工技术教育部重点实验室, 杭州 310018)

**摘要:** 获得了硫脲在水和乙醇溶液中A吸收带的共振拉曼光谱, 通过B3LYP/6-311++G(3df,3pd)和RCIS/6-311++G(3df,3pd)分别对硫脲的电子跃迁和 $2^1A$ 激发态鞍点结构进行了研究. 对共振拉曼光谱进行了归属, 并通过含时波包理论对吸收光谱和共振拉曼光谱进行拟合, 结果表明硫脲动态结构特征主要沿着: C=S伸缩振动 $\nu_6$ ( $|\Delta|$ =0.95)、 $H_5N_3H_6+H_8N_4H_7$ 弯曲振动 $\nu_5$ ( $|\Delta|$ =0.19)、NCN对称伸缩振动+C=S伸缩振动+N $_3H_6+H_8N_4$ 弯曲振动 $\nu_4$ ( $|\Delta|$ =0.18).  $\nu_{15}$ 倍频 $2\nu_{15}$ 和 $4\nu_{15}$ 强度主要归因于 $\nu_{15}$ 激发态频率的改变而不是简正模位移量的变化. 对S=CN $_2$ 面外变形振动 $\nu_{15}$ 倍频出现的机理进行了探究, 结果表明Franck-Condon区域势能面鞍点是标准A项共振拉曼散射里的二次声子机制的驱动力, 导致碳原子中心的锥形化, 并使硫脲在 $2^1A$ 激发态发生几何结构扭曲.

**关键词:** 硫脲, 激发态结构动力学, 共振拉曼光谱, 含时波包理论, 密度泛函理论

**酪胺和多巴胺VUV光电离/解离的实验和理论研究** ..... 11  
郭会军, 叶莉莉, 贾良元, 张李东\*, 齐飞 (中国科学技术大学国家同步辐射实验室, 合肥 230029)

**摘要:** 利用同步辐射真空紫外光电质谱和理论计算对中性酪胺和多巴胺分子的电离解离过程进行研究. 在较低光子能量下, 通过近阈光电离仅得到母体离子信号. 当增加光子能量到11.7 eV甚至更高时, 从酪胺和多巴胺分别得到四个清晰可辨的碎片离子信号. 另外通过测量母体离子的光电离效率曲线, 酪胺和多巴胺分子的电离能分别为7.98和7.67 eV(实验误差为 $\pm 0.05$  eV). 结合理论计算建立这两个分子的详细碎裂路径, 包括相似的胺乙基消除路径. 其中碎片 $C_7H_5O_2^+$ ( $m/z$ =124)和 $C_7H_8O^+$ ( $m/z$ =108)的生成认为是来自McLafferty重排, 该过程经历分子内的 $\gamma$ 氢迁移诱导的 $\beta$ 裂解反应. 另外, C7-C8键直接开裂可以生成 $CH_2NH_2^+$ ( $m/z$ =30)碎片离子, 并且该过程和McLafferty重排为主要的裂解路径.

**关键词:** 酪胺, 多巴胺, VUV光电离, 质谱, 电离能, 解离路径

**氧离子辐照二氧化钛单晶后的结构与磁性** ..... 19  
丁斌峰\*, 相风华 (廊坊师范学院物理与电子信息学院, 廊坊 065000)

**摘要:** 氧离子辐照二氧化钛单晶可以诱发其铁磁性. 辐照后在室温下也能观察到二氧化钛的铁磁性, 且对温度依赖性较小. 结合X射线衍射实验、卢瑟福背散射/沟道实验、拉曼散射实验谱、电子自旋共振实验谱、超导量子干涉仪实验、单位原子随沟道位移实验, 测定了晶格的损伤随辐照流强的增加而增加. 发现在氧离子辐照二氧化钛时出现了 $Ti^{3+}$ 替代氧空位( $O_V$ )的缺陷复合体, 即形成 $Ti^{3+}-O_V$ 复合体. 这种缺陷复合体导致了局部( $TiO_{6-x}$ )的拉曼模式的伸展. 说明了 $Ti^{3+}$ 结合一个未成对的3d电子是二氧化钛局部铁磁性的起源.

**关键词:** 卢瑟福背散射/沟道实验, 单位原子位移实验, 空位与间隙

**碳、氮和氧族元素取代对2,1,3-苯并噻二唑衍生物的电子、光谱、电荷传输性质影响的理论研究** ..... 25  
胡波<sup>a,b,\*</sup>, 姚焯<sup>a,b</sup>, 王庆伟<sup>a,b</sup>, 张浩<sup>c</sup>, 于健康<sup>c,d</sup> (a. 吉林师范大学化学学院, 四平 136000; b. 吉林师范大学环境友好材料制备与应用省部共建教育部重点实验室, 四平 136000; c. 吉林大学理论化学计算国家重点实验室, 长春 130023; d. 辽宁工程技术大学基础学部应用物理与技术实验室, 葫芦岛 123000)

**摘要:** 采用量子化学方法设计并研究了一系列 $CH_2$ 、 $NH$ 、 $O$ 和 $Se$ 取代的2,1,3-苯并噻二唑衍生物的电子性质、光谱性质和电荷传输性质. 采用的研究方法是从头算Hartree-Fock和密度泛函方法. 研究结果表明, 中心芳环的S原子分别被 $CH_2$ 、 $NH$ 、 $O$ 和 $Se$ 取代后, 母体分子的电子性质、光谱性质以及电荷传输性质得到了很好的调节. 根据得到的理论研究结果, 在2,1,3-苯并噻二唑衍生物基础上进行结构修饰得到的一系列分子可以作为有机发光二极管中的有机发光材料.

**关键词:** 有机电致发光, 2,1,3-苯并噻二唑, 电子性质, 光谱性质, 重组能

**拉曼散射在共振及近共振时的条件: 广义短时间近似** ..... 31  
Abdelsalam Mohammed<sup>a</sup>, 孙玉萍<sup>a,b</sup>, 苗泉<sup>a,c,\*</sup>, Hans Ågren<sup>a</sup>, Faris Gel'mukhanov<sup>a</sup> (a. 瑞典皇家理工学院生物技术系理论化学组, S-10691 斯德哥尔摩; b. 山东理工大学理学院, 淄博 255049; c. 山东师范大学物理与电子科学学院, 济南 250014)

**摘要:** 研究了频率失谐时共振拉曼散射的动力学过程. 当入射光子能量远离共振吸收能量时, 域内的失相使散射过程变快. 这使得频率失谐如同照相机的快门功能, 具有规律的散射持续时间, 为普通的稳态测量提供了控制散射时间的有效工具. 基于这个理论对两个多模式模型系统以及反式-1,3,5-己三烯和鸟嘌呤-胞嘧啶Watson-Crick碱基对分子的共振拉曼光谱进行了研究. 除了这些特殊的物理效应, 快散射机制可以简化光谱, 同时使散射理论得到简化. 当入射光子频率在共振区域时, 拉曼光谱中会出现较强的多倍频成分; 当入射光子频率与第一共振吸收频率之间的失谐量为振动能量时, 在快散射过程中, 这些多倍频成分逐渐消失. 因此, 利用入射光子与共振频域的失谐可以明显地简化拉曼光谱, 从复杂光谱中去除多倍频和软模的影响, 并且可以避免共振态的解离和荧光衰减引起的干扰.

**关键词:** 共振拉曼, 散射持续时间, 己三烯, 短时间近似

**氧化锌中性氮杂质第一性原理研究** ..... 48  
李平<sup>a,\*</sup>, 邓胜华<sup>b</sup>, 李义宝<sup>a</sup>, 张莉<sup>a</sup>, 刘果红<sup>a</sup>, 黄静<sup>c</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; c. 安徽建筑工业学院材料科学与化学工程学院, 合肥 230022)

**摘要:** 以第一性原理计算为基础, 研究了氧化锌中性氮杂质的原子和电子结构、缺陷形成能等. 根据计算结果, 氮杂质为深受主, 因此对氧化锌的p型导电性没有贡献. 在各种中性氮杂质中, 替代氧位的氮有最低的形成能和最浅的受主能级, 在富氧条件下替代锌位的氮的形成能次之. 氮间隙在四面体位置不稳定, 会自动弛豫到kick-out结构. 尽管氮可能会占据八面体间隙位置, 但由于形成能过高因此其浓度会较低. 同时还讨论了各种掺杂情形下的电荷密度分布, 得到了自洽的结果.

**关键词:** 第一性原理, 氧化锌, 氮, 掺杂

**延迟基因开关体系的稳定性及转变动力学** ..... 53  
张睿挺<sup>a</sup>, 陈含爽<sup>a</sup>, 侯中怀<sup>a,b,\*</sup> (a. 中国科学技术大学化学物理系, 合肥 230026; b. 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:** 对延迟基因开关体系的稳定性及转变动力学进行了系统的研究. 通过前向流采样及延迟随机模拟方法, 获得了相空间稳态分布、转变路径和速率以及转变态系综的分布等信息. 数值结果表明, 基因开关体系中的延迟会减小稳态之间的间距, 增大体系在转变态的布局. 此外, 转变速率也会随着延迟时间的增大单调增加, 这些现象都说明延迟会削弱双稳基因开关体系的稳定性. 转变路径由两种转录因子蛋白质的总的粒子数的差和操纵子位点的状态来描述, 对转变路径的数值分析表明转录和翻译过程导致的延迟会显著影响转变动力学. 特别是对于转变态系综而言, 操纵子结合两种不同二聚体概率的差异随着延迟时间的增加逐渐加大.

**关键词:** 基因开关, 延迟, 前向流采样

**$B_{12}N_{12}$ 纳米笼: 潜在的二氧化氮检测传感器** ..... 60  
Javad Beheshtian<sup>a</sup>, Mohammad Kamfiroozi<sup>b</sup>, Zargham Bagheri<sup>c</sup>, Ali Ahmadi Peyghan<sup>d,\*</sup> (a. 伊朗Shahid Rajaei教师培训大学化学系, 16875-163, 德黑兰; b. 伊斯兰阿扎德大学西拉分校化学系, 西拉; c. 伊斯兰阿扎德大学Islamshahr分校理学系物理组, 33135-369, Islamshahr, 德黑兰; d. 伊朗伊斯兰阿扎德大学Young研究人员俱乐部, 德黑兰)

**摘要:** 利用密度泛函理论通过计算吸附能量、HOMO/LUMO能隙变化、电荷转移、结构扭曲等研究二氧化氮分子在 $B_{12}N_{12}$ 纳米笼的吸附. 此外, 通过计算 $B_{12}N_{12}$ 的电子结合能、Gibbs自由能、态密度和分子表面的静电势研究其稳定性和其它特性.  $B_{12}N_{12}$ 纳米笼吸附二氧化氮显示三种构型.  $B_{12}N_{12}$ 团簇的HOMO/LUMO能隙变化对二氧化氮分子的存在非常敏感, 从自由团簇的6.84 eV降为 $NO_2$ /团簇稳定团簇的3.23 eV. 团簇的导电性被极大地提高, 表明 $B_{12}N_{12}$ 纳米笼可能是潜在的二氧化氮气体分子检测传感器.

**关键词:** 二氧化氮,  $B_{12}N_{12}$ 纳米笼, 密度泛函理论, 吸附

**用扩散蒙特卡罗方法研究 $BH_2$ 、 $B(OH)_2$ 、 $BCl_2$ 和 $BCl$ 的键离解能** ..... 65  
李会然<sup>a</sup>, 程新路<sup>a</sup>, 张红<sup>a,b,\*</sup> (a. 四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065; b. 四川大学物理科学与技术学院, 成都 610065)

**摘要:** 采用扩散蒙特卡罗(DMC)方法计算了 $BH_2$ 、 $B(OH)_2$ 、 $BCl_2$ 和 $BCl$ 的HB-H和HOB-OH的键离解能, 同时也研究了轨道选择和Backflow变换对DMC计算结果的影响. 在Slater-Jastrow DMC(SJ-DMC)计算方法中, 当采用B3PW91轨道时得到的HB-H

和HOB-OH键离解能分别是359.1±0.12和98.2±0.12 kJ/mol; 用B3LYP/SJ-DMC计算键离解能得到了与用B3PW91/SJ-DMC方法类似的结果. 通过BF-DMC(即在DMC中引入backflow修正)计算得到的HB-H键离解能为369.6±0.12 kJ/mol, 也得到了更加接近实验值的HOB-OH键离解能为446.0±1.84 kJ/mol. 由DMC的计算结果可以断定HB-H的键离解能的实验值为375.8 kJ/mol. 另外还给出了BCl<sub>2</sub>和BCl的键离解能的计算结果.

**关键词:** 键离解能, 扩散蒙特卡罗方法, 轨道选择, Backflow变换

#### 双稳动力学系统中耦合效应对逻辑随机共振现象的增强作用 ..... 70

吴昊<sup>a</sup>, 江慧军<sup>a</sup>, 侯中怀<sup>a,b,\*</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. 中国科学技术大学化学物理系, 合肥 230026)

**摘要:** 研究了电路耦合作用对逻辑随机共振现象以及逻辑门器件稳定性的影响. 相对于单个的逻辑门电路, 耦合的逻辑门器件可以在更宽的噪声范围内都保持逻辑运算的准确性, 即耦合作用可以增强逻辑随机共振现象. 此外, 这种增强效应随着耦合体系尺度的增大而增大, 但是当体系尺度达到一定程度时, 这种增强作用达到一个稳定值. 最后还考察了耦合强度的影响, 发现随着耦合强度的增加, 逻辑门器件可以保持逻辑运算准确性所对应的噪声区间非单调地改变, 表现出一种共振的行为.

**关键词:** 逻辑门电路, 噪声, 耦合, 逻辑随机共振

#### 甘氨酸-苯丙氨酸-甘氨酸-甘氨酸四肽气相稳定构型的系统寻找 .. 77

陈惠宾, 王耀, 陈欣, 林子敬\* (中国科学技术大学微尺度物质科学国家实验室, 合肥 230026)

**摘要:** 利用PM3、HF和BHandHLYP方法的结合, 系统寻找了甘氨酸-苯丙氨酸-甘氨酸-甘氨酸(GFGG)四肽在气相中的稳定构型. 对该构型寻找方法进行了详细的描述, 并给出了一些重要构型的基本参数, 如电子能、零点振动能、偶极矩、转动常数、垂直电离能和不同温度的构型分布等. 通过对重要构型结构特征的分析, 发现熵的效应是决定构型稳定性的重要因素, 并讨论指出了对构型偶极矩和特征振动模的测量是验证理论预言的有效途径. 对GFGG构型与蛋白质二级结构的联系的分析表明, GFGG低能构型出现了类似于 $\alpha$ -螺旋的局域结构, 以及数量可观的蛋白质 $\beta$ 转角和 $\gamma$ 转角的局域结构.

**关键词:** 势能面, 构型稳定性, 氢键, 熵效应, 二级结构

#### 氢化和氨化对SrTiO<sub>3</sub>的可见光催化增强 ..... 86

孙涛, 赵有源, 陆明\* (复旦大学光科学与工程系, 教育部微纳光子晶体重点实验室, 上海 200433)

**摘要:** 对STO(SrTiO<sub>3</sub>)(100)晶片在多个温度下进行氢化和氨化. 氢化和氨化分别在混合气体(H<sub>2</sub>:N<sub>2</sub>=5%:95%)和NH<sub>3</sub>气中退火进行. 实验发现, 当氢化温度 $\geq 900$  °C时, STO的紫外光催化有显著增强, 但仍不产生可见光催化; 当氨化温度 $\geq 800$  °C时, 由于N掺杂将导致出现STO可见光催化. 进一步研究发现, 先氢化再氨化STO光催化能力几乎和单独氨化的STO相同; 但是先氨化再氢化STO可见光催化将显著增强, 即存在氢化和氨化的协同效应.

**关键词:** SrTiO<sub>3</sub>, 氢化, 氨化, 光催化, 协同效应

#### 由纳米管和纳米颗粒构成的TiO<sub>2</sub>膜的制备与机理研究 ..... 91

杨笛<sup>a,\*</sup>, 王义全<sup>a</sup>, 任国斌<sup>a</sup>, 冯帅<sup>a</sup>, 陈媛媛<sup>b</sup>, 王文忠<sup>a</sup> (a. 中央民族大学理学院, 北京 100081; b. 北京工商大学计算机与信息工程学院, 北京 100048)

**摘要:** 采用聚苯乙烯小球修饰Ti片表面, 并进行阳极氧化, 制备出一种由纳米颗粒和纳米管构成的TiO<sub>2</sub>膜. 通过数值模拟, 分析了氧化表面附近的局部电场分布对TiO<sub>2</sub>膜形貌的影响. 结果表明, 覆盖物增强了局部电场, 从而加快了O<sup>2-</sup>与Ti的反应速率, 有利于TiO<sub>2</sub>的生长; 与此同时, [TiF<sub>6</sub>]<sup>6-</sup>的扩散受到阻碍, 使得TiO<sub>2</sub>的溶解速率减慢. 可见, 覆盖物打破了TiO<sub>2</sub>纳米管形成的平衡条件, 导致纳米颗粒的生成. 此外, 通过X射线衍射和Raman光谱的测试分析发现, 所制备的TiO<sub>2</sub>为锐钛矿结构.

**关键词:** 阳极氧化, TiO<sub>2</sub>膜, 纳米管

#### 铜掺杂介孔TiO<sub>2</sub>光催化剂的制备、表征及其光催化性能 ..... 96

石中亮<sup>a</sup>, 赖虹<sup>a</sup>, 姚淑华<sup>a,\*</sup>, 王少峰<sup>b,\*</sup> (a. 沈阳化工大学应用化学学院, 沈阳 110142; b. 中国科学院沈阳应用生态研究所, 沈阳 110016)

**摘要:** 以钛酸四正丁酯和硝酸铜为原料, 以P123为模板剂, 采用模板法合成了La掺杂型介孔TiO<sub>2</sub>光催化剂, 借助TG-DSC、BET、XRD及UV-Vis等测试手段对样品进行了表征, 并以苯酚为模型污染物考察了铜掺杂量对样品光催化活性的影响. 结果表

明: La掺杂介孔TiO<sub>2</sub>光催化剂孔径分布较均匀( $\sim 10$  nm), 比表面积可达165 m<sup>2</sup>/g, 与纯介孔TiO<sub>2</sub>相比, 经掺杂改性后的样品在紫外光区及可见光区的吸收显著增强, 对光具有更高的利用率, La掺杂可显著提高介孔TiO<sub>2</sub>的光催化活性.

**关键词:** 介孔TiO<sub>2</sub>, 铜掺杂, 光催化活性, 苯酚

#### 焙烧温度对SiO<sub>2</sub>负载的Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>纳米粒子表面氧缺陷浓度和CO氧化催化性能的影响 ..... 103

李金兵<sup>a</sup>, 姜志全<sup>b</sup>, 千坤<sup>b</sup>, 黄伟新<sup>b,\*</sup> (a. 中国石化北京北化院燕山分院, 北京 102500; b. 中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室(筹), 中国科学院能量转换材料重点实验室, 化学物理系, 合肥 230026)

**摘要:** 以传统的浸渍法, 在不同焙烧温度下制备了用于CO氧化反应的Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/SiO<sub>2</sub>催化剂. 通过激光拉曼光谱(Raman)、X射线光电子能谱(XPS)、X射线衍射(XRD)、程序升温还原(TPR)和X射线吸收精细结构谱(XAFS)表征了该系列催化剂的结构. 在所有的催化剂中, XRD和Raman光谱都只检测到了Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>晶相的存在. 与Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>体相相比, XPS结果表明在200 °C焙烧的(Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>(200)/SiO<sub>2</sub>)催化剂中Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>表面上存在着过量的Co<sup>2+</sup>. 与XPS的结果一致, TPR结果表明Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>(200)/SiO<sub>2</sub>催化剂中Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>表面上存在氧缺陷, 并且XAFS结果也表明Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>(200)/SiO<sub>2</sub>催化剂中Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>具有更多的Co<sup>2+</sup>. 提高焙烧温度使得过量的Co<sup>2+</sup>进一步氧化为Co<sup>3+</sup>, 同时降低了表面氧缺陷浓度, 从而得到计量比的Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/SiO<sub>2</sub>催化剂. 在所有的负载催化剂中, Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>(200)/SiO<sub>2</sub>催化剂表现出了最好的CO氧化催化性能, 表明过量Co<sup>2+</sup>和表面氧缺陷的存在能够促进Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>催化CO氧化反应的活性.

**关键词:** Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/SiO<sub>2</sub>催化剂, CO氧化, 焙烧温度, 表面氧缺陷

#### 压强对低频PECVD制备SiN<sub>x</sub>:H薄膜特性的影响 ..... 110

闻震利\*, 曹晓宁, 周春兰, 王文静 (中国科学院电工研究所, 太阳能热利用及光伏系统国家重点实验室, 北京 100190)

**摘要:** 氮化氮硅薄膜在晶体硅太阳能电池工艺中是一种有效的减反射、钝化薄膜. 利用Centrotherm公司的直接法低频PECVD设备在抛光后的p型硅衬底(1.0  $\Omega$ cm)表面制作氮化氮硅, 得到了具有较好钝化效果且折射率为2.017~2.082的薄膜. 随着压强的增加, 薄膜的折射率略有增加. 利用傅里叶变换红外光谱技术研究了薄膜中成键结构特性随压强的变化. 结果表明沉积压强强烈的影响了H键的浓度和Si-N键的浓度. 其中硅的悬挂键浓度是影响薄膜钝化特性的关键因素. 最后给出了样品有效少子寿命随时间的衰减特性, 并利用成键结构对钝化的影响给出了这种衰减的原因.

**关键词:** 氮化硅薄膜, 压强, 钝化, 结构特性

#### 2-2型磁电复合薄膜CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Pb(Zr<sub>0.53</sub>Ti<sub>0.47</sub>)O<sub>3</sub>静磁耦合 .. 115

许育东\*, 王雷, 石敏, 苏海林\*, 伍光 (合肥工业大学材料科学与工程学院, 合肥 230009)

**摘要:** 运用溶胶-凝胶法在Pt/Ti/SiO<sub>2</sub>/Si基片上旋涂制备了2-2型CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Pb(Zr<sub>0.53</sub>Ti<sub>0.47</sub>)O<sub>3</sub>磁电复合薄膜. 制备的磁电薄膜结构为基片/PZT/CFO/PZT\*/CFO/PZT, 通过改变中间层PZT\*溶胶的浓度, 改变磁性层间距以及静磁耦合的大小. SEM结果表明, 复合薄膜结构致密, 呈现出界面清晰平整的多层结构. 制备的复合薄膜具有较好的铁电与铁磁性能. 实验还研究了静磁耦合对薄膜磁电性能的影响, 结果表明, 随着复合薄膜磁性层间距的减小, 静磁耦合效应的增加, 磁电电压系数有逐渐增大的趋势.

**关键词:** 磁电, 复合薄膜, 静磁耦合

#### 聚(N-异丙基丙烯酰胺)模板法制备二氧化硅中空微球 ..... 120

汪谟贞<sup>a,\*</sup>, 陈宇晨<sup>a</sup>, 葛学平<sup>b</sup>, 葛学武<sup>a</sup> (a. 中国科学院软物质化学重点实验室, 中国科学技术大学高分子材料科学与工程系, 合肥 230026; b. 华东理工大学理学院核技术与应用研究所, 上海 200237)

**摘要:** 以在50 °C水溶液中析出的聚(N-异丙基丙烯酰胺) (PNIPAM)聚集体作为软模板, 使正硅酸乙酯吸附在PNIPAM聚集体表面进行水解缩合, 原位生成二氧化硅包裹PNIPAM的核壳结构微球; 进一步冷却至室温使PNIPAM溶解在水中除去内核, 从而成功合成SiO<sub>2</sub>中空微球. 实验表明, 只有在足够的PNIPAM和正硅酸乙酯含量以及正硅酸乙酯水解时间下, 才能形成稳定的SiO<sub>2</sub>中空微球. 用TEM、SEM和FTIR对合成的SiO<sub>2</sub>中空微球进行了表征, 结果表明, 微球尺寸为150 nm左右, 并且由于PNIPAM上酰胺基团和正硅酸乙酯水解出来的硅醇间具有静电相互作用, 使得SiO<sub>2</sub>壳层上依然有PNIPAM残留.

**关键词:** SiO<sub>2</sub>中空微球, 聚(N-异丙基丙烯酰胺), 正硅酸乙酯, 软模板