

## Chinese Abstracts (中文摘要)

Ni-BaZr<sub>0.1</sub>Ce<sub>0.7</sub>Y<sub>0.2</sub>O<sub>3-δ</sub>金属-陶瓷中空纤维膜的氢渗透性能... 125

杨春利<sup>a</sup>, 许启明<sup>a</sup>, 朱志文<sup>b</sup>, 刘卫<sup>b\*</sup> (a. 西安建筑科技大学材料科学与工程博士后科研流动站, 西安 710055; b. 中国科学技术大学材料科学与工程系, 中国科学院能量转换材料重点实验室, 合肥 230026)

**摘要:** 通过将相转化法制备的NiO-BaZr<sub>0.1</sub>Ce<sub>0.7</sub>Y<sub>0.2</sub>O<sub>3-δ</sub>(BZCY)纤维膜生坯在5% H<sub>2</sub>/95% Ar混合气体中直接烧结, 制备出了气密具有“三明治”结构的Ni-BZCY金属陶瓷中空纤维膜. 靠近内外表面是指状孔结构而中间部分是致密层. 当膜管外湿润的20% H<sub>2</sub>/80% N<sub>2</sub>混合气体流量是200 mL/min, 膜管内高纯Ar气的流量是150 mL/min时, Ni-BZCY中空纤维膜的氢渗透率达到了0.53 μmol/cm<sup>2</sup>s.

**关键词:** 中空纤维, 金属陶瓷, 氢渗透, 相转化

线形C<sub>5</sub>H自由基A<sup>2</sup>Δ电子态的自选轨道分裂和寿命展宽... 129

Mohammad Ali Haddad<sup>a</sup>, 赵东锋<sup>a\*</sup>, Harold Linnartz<sup>a,b</sup>, Wim Ubachs<sup>a</sup> (a. 荷兰阿姆斯特丹自由大学, 阿姆斯特丹激光、生命和生物光子科学研究所, 阿姆斯特丹 NL-1081 HV; b. 荷兰莱顿大学, 莱顿天文台 Sacker天体物理实验室, 莱顿 NL-2300 RA)

**摘要:** 重新研究了C<sub>5</sub>H和C<sub>5</sub>D自由基A<sup>2</sup>Δ-X<sup>2</sup>Π电子吸收谱带. 利用乙炔/氦混合气脉冲直流感电产生的碳氢等离子体制备气相C<sub>5</sub>H和C<sub>5</sub>D自由基, 利用光腔衰荡光谱记录碳氢等离子体束的直接吸收光谱. 与之前工作相比, 实验光谱的波长校准得到了改进. 通过对实验光谱的分析, 首次实验确定了C<sub>5</sub>H自由基A<sup>2</sup>Δ电子态的自旋-轨道分裂常数为-0.7(3) cm<sup>-1</sup>. 这为标识A<sup>2</sup>Δ电子态的提供了有力的实验证据. 通过对谱带寿命展宽的分析, A<sup>2</sup>Δ电子态的寿命估测为1.6±0.3 ps.

**关键词:** 光腔衰荡光谱, 碳氢自由基, 星际分子, C<sub>5</sub>H

## 溶液中金纳米棒形成过程的光谱动力学分析... 135

王莹莹, 李博轩, Silviye Vdovic, 王雪飞\*, 夏安东 (中国科学院化学研究所分子反应动力学国家重点实验室, 北京 100190)

**摘要:** 通过动态光谱跟踪溶液中金纳米棒的尺度和长径比(AR)的变化, 成功地获取粒子的生长过程的动态数据. 该过程分为两步: 种子快速形成棒状粒子; 棒状粒子在一定AR下的生长. 通过分析体系中的一价金、金粒子和抗坏血酸之间的电荷转移过程, 建立了金纳米棒生长过程的电荷转移模型, 并很好地解释了动态光谱的实验数据.

**关键词:** 金纳米棒, 生长机制, 电荷转移

自发拉曼光谱法测量O<sub>2</sub>(<sup>1</sup>Δ)产率中氯气荧光干扰的消除... 142

崔荣荣, 石文波\*, 邓列征, 杨何平, 沙国河, 张存浩 (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)

**摘要:** 利用自发拉曼光谱法测量O<sub>2</sub>(<sup>1</sup>Δ)产率的过程中发现O<sub>2</sub>(<sup>1</sup>Δ)和O<sub>2</sub>(<sup>3</sup>Σ)拉曼光谱上叠加有氯气荧光光谱, 严重影响了O<sub>2</sub>(<sup>1</sup>Δ)产率的测量. 为此, 利用气体分子的拉曼光谱具有偏振特性, 而荧光光谱没有偏振特性的特点对测量O<sub>2</sub>(<sup>1</sup>Δ)产率的自发拉曼光谱法进行了改进. 实验结果表明, 这一改进可有效消除氯气荧光干扰, 使单重态氧发生器在氯气利用率为88%时的O<sub>2</sub>(<sup>1</sup>Δ)产率可很容易地被确定为(42.4±7.4)%.

**关键词:** 化学氧碘激光, 单重态氧产率, 自发拉曼光谱, 氯气荧光

## 具有高能密特性的铝团簇氢化物... 147

连科研<sup>a,b</sup>, 姜远飞<sup>a</sup>, 费德厚<sup>a</sup>, 冯伟<sup>a</sup>, 金明星<sup>a</sup>, 丁大军<sup>a\*</sup>, 罗毅<sup>b,c</sup> (a. 吉林大学原子与分子物理研究所, 吉林 130012; b. 瑞典皇家理工学院理论化学系; c. 中国科学技术大学微尺度物质科学国家重点实验室, 合肥 230026)

**摘要:** 通过第一性原理计算得到了稳定的(AlH<sub>3</sub>)<sub>n</sub>的笼形结构.(AlH<sub>3</sub>)<sub>n</sub>笼形结构中的铝团簇骨架具有n个顶角, 2n条Al-Al边, 吸附的氢原子中有n个位于顶位, 与Al原子形成共价键, 2n个位于桥位, 同铝原子一起构成了Al-H-Al的笼形骨架. 以Al<sub>12</sub>H<sub>36</sub>的笼形结构为单元得到了(Al<sub>12</sub>H<sub>36</sub>)<sub>n</sub>的链状结构, 该链状结构与(AlH<sub>3</sub>)<sub>n</sub>的链状结构具有相同的链接方式. 同时Al<sub>12</sub>H<sub>36</sub>的热力学性质研究表明其可能成为一种高能密材料.

**关键词:** 密度泛函, 铝团簇, 高能密材料

## 用相互作用势指数估算单取代烷烃生成焓... 153

武亚新<sup>a,b</sup>, 曹晨忠<sup>b\*</sup>, 袁华<sup>b</sup> (a. 中南大学化学化工学院, 长沙 410083; b. 湖南科技大学化学化工学院, 理论化学与分子模拟教育部重点实验室, 分子构效关系湖南省普通高校重点实验室, 湘潭

411201)

**摘要:** 基于直链烷烃生成焓的实验值提出16种取代基X(OH、SH、NH<sub>2</sub>、Br、Cl、I、NO<sub>2</sub>、CN、CHO、COOH、CH<sub>3</sub>、CH=CH<sub>2</sub>、C≡CH、Ph、COCH<sub>3</sub>、COOCH<sub>3</sub>)的相互作用势指数IPI(X). 用IPI(X)和极化效应指数建立模型, 对单取代烷烃RX(包括含支链的化合物)的生成焓进行估算, 所得回归方程有良好的相关性, 该模型既考虑了基团R和X的贡献, 又考虑了R与X相互作用的贡献. 并采用留一法对其稳定性和预测能力进行验证.

**关键词:** 相互作用势指数, 取代基, 单取代烷烃, 生成焓, 极化效应指数

## TEMPO及其衍生物充放电过程中电子得失理论特性... 161

毛淑才<sup>a\*</sup>, 瞿金清<sup>b</sup>, 郑康成<sup>c</sup> (a. 仲恺农业工程学院化学化工学院, 广州 510225; b. 华南理工大学化学与化工学院, 广州 510640; c. 中山大学化学与化学工程学院, 广州 510275)

**摘要:** 在(U)B3LYP/6-31G(d,p)或6-31+G(d,p)基组水平上用密度泛函方法对2,2,6,6-四甲基哌啶-1-氧自由基(TEMPO)及其阳离子衍生物在充放电过程中的电子结构和相关性质进行了理论研究. 结果表明在充放电过程中取代基对物质的电子结构和相关性质变化起着重要作用. TEMPO得电子后以单线态存在形式更稳定而阳离子衍生物却以三线态存在形式更稳定. 对TEMPO而言, 无论是充电过程还是放电过程对自由基的N和O的电子特性都有很大影响; 对阳离子衍生物而言, 放电过程主要影响吡啶端而充电过程主要影响自由基端的变化. 溶剂作用对自由基的某些键长与电荷分布有一定影响. 另外, 用TDDFT方法对TEMPO及衍生物的紫外吸收光谱进行了计算和模拟, 结果与实验数据吻合.

**关键词:** TEMPO, 充放电过程, 电子结构, 密度泛函计算

## Cu原子掺杂在Al团簇中的结构和电子性质... 169

成西会<sup>a,b\*</sup>, 丁大军<sup>b\*</sup>, 余永刚<sup>a</sup>, 金明星<sup>b</sup> (a. 南京理工大学能源与动力工程学院, 南京 210094; b. 吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130012)

**摘要:** 利用密度泛函理论, 对Al<sub>n</sub>(n=1~15)团簇中掺杂Cu原子后的双金属团簇进行了研究, 在结构优化的基础上, 同时计算了双金属团簇的电子性质, 即电子亲和能、电离势、Cu原子的Mulliken分布、平均极化率、极化率各向异性、偶极矩及HOMO-LUMO能隙随团簇尺寸增加时的变化情况. 结果表明, Cu掺杂Al团簇的双金属团簇中也存在幻数结构, 团簇的电子性质随团簇尺寸大小出现不规则的奇偶振荡变化. n=13的团簇电子亲和能和电离势与毗邻团簇相比, 其变化要大于0.3和0.6 eV.

**关键词:** 密度泛函理论, 电子性质, Cu原子掺杂Al团簇

## 基于Gay-Berne势能模型的粗粒化动力学模拟研究正丁醇的玻璃态相变... 177

谢桂龙<sup>a</sup>, 张永红<sup>b</sup>, 黄世萍<sup>a\*</sup> (a. 北京化工大学有机无机复合材料国家重点实验室, 北京 100029; b. 天津工业大学物理系, 天津 300387)

**摘要:** 通过基于Gay-Berne势能模型的粗粒化动力学模拟, 研究液态正丁醇体系的冷却过程. 采用密度泛函计算, 拟合出适合正丁醇体系的GB势能参数. 体系的密度、平均势能等性质随温度的降低(由290 K降至50 K, 间隔为10 K)发生特殊变化, 即体系发生玻璃态相变, 相变温度为T<sub>g</sub>=120±10 K, 与实验值110±1 K符合很好.

**关键词:** Gay-Berne势能, 粗粒化动力学模拟, 玻璃态相变

## 分级构建势能面中低级别势能面精度... 186

王春锐, 张东辉\* (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和理论与计算化学中心, 大连 116023)

**摘要:** 通过构建一系列H<sub>3</sub>体系的UHF(UCCSD(T)、DFT-B3LYP、UMP2)/vtz和UCCSD(T)/avqz级别的势能面, 研究了分级构建方案中低级别势能面对最终势能面精度的影响. 基于这些势能面计算得到的H+H<sub>2</sub>反应的总反应速率表明, UCCSD(T)/avqz势能面的精度与著名的BKMP2势能面非常接近, 得到的势垒略微偏高. 作为对比, 尽管低级别理论(UHF、UMP2、DFT-B3LYP)加上vtz基组在复杂体系中得到了广泛地应用, 但是它们对这个最简单的反应只能提供一个定性的描述. 另一方面, 尽管这些理论不能准确描述这个反应, 但是可以应用它们来得到到分级构建中的低级别势能面, 从而建立精度级别为UCCSD(T)/avqz的势能面, 使得所需要的UCCSD(T)/avqz能量的数目大大减少.

**关键词:** 分级构建方案, 势能面精度, 三次样条插值

纤维素二级结构的分子动力学模拟 ..... 191  
吴帅<sup>a</sup>, 占海艺<sup>b</sup>, 王红明<sup>a\*</sup>, 居燕<sup>a\*</sup> (a. 南昌大学高等研究院, 南昌 330031; b. 南昌工程学院, 南昌 330031)

**摘要:** 运用分子动力学模拟的方法, 详细研究了 $\beta$ -纤维素的二级结构. 随着糖链数量的增加, 纤维素也变成螺旋型结构. 当糖链数量为6、24和36时, 纤维素的结构为右手螺旋. 但是, 当糖链数量为8、12、16、时, 纤维素的结构为左手螺旋. 计算还表明, 当糖链数量为36时, 结构最稳定.

**关键词:**  $\beta$ -纤维素, 粗粒度模型, 二级结构, 分子动力学

甲醇在Pt(100)表面吸附与解离的第一性原理研究 ..... 199  
汪卓<sup>a</sup>, 阚二军<sup>b</sup>, 杨金龙<sup>a\*</sup> (a. 中国科学技术大学微尺度物质科学国家实验室, 合肥 230026; b. 南京理工大学应用物理系, 南京 210037)

**摘要:** 采用基于第一性原理的密度泛函理论结合周期模型方法对甲醇在Pt(100)完整表面的吸附与解离进行了研究. 通过比较不同吸附位置的吸附能与构型参数发现, 表面top吸附位为最稳定吸附位, 甲醇分子通过氧原子吸附于Pt(100)表面. 同时计算了甲醇分子在top吸附位可能的解离路径, 发现在解离过程中OH键首先断裂的路径为最低能量路径. 分解生成的若干产物其吸附稳定性排序为 $\text{CH}_3\text{O} > \text{CH}_2\text{OH} > \text{CH}_3 > \text{CH}_2\text{O}$ .

**关键词:** 甲醇, Pt(100)表面, 吸附, 解离

$\text{Bi}(\text{Fe}_{1-x}\text{Mn}_x)\text{O}_3$ 的结构与磁性 ..... 204  
丁斌峰 (廊坊师范学院物理与电子信息学院, 廊坊 065000)

**摘要:** 使用快速烧结和溶胶-凝胶方法制备了 $\text{Bi}(\text{Fe}_{1-x}\text{Mn}_x)\text{O}_3$ 的块材陶瓷, 其 $x$ 能够达到0.3, 因而可以得到较细的粉末. 经X射线衍射谱和拉曼光谱研究发现其结构转变取决于锰的掺杂浓度. 当 $x=0.05$ 和0.1时,  $\text{Bi}(\text{Fe}_{1-x}\text{Mn}_x)\text{O}_3$ 的结构保持斜方六面体结构; 当 $x=0.3$ 时,  $\text{Bi}(\text{Fe}_{1-x}\text{Mn}_x)\text{O}_3$ 的结构变化到正方六面体结构. 在 $x=0.05$ 和0.1时观测到弱铁磁性, 但在 $x=0.3$ 时观测到强顺磁性. 这显示了 $\text{Bi}(\text{Fe}_{1-x}\text{Mn}_x)\text{O}_3$ 从反铁磁性到顺磁性的磁相变, 同时也表明其结构从R3C变化到C222. 在30和140 K,  $x=0.05$ 和0.1时, 观察到 $\text{Bi}(\text{Fe}_{1-x}\text{Mn}_x)\text{O}_3$ 的两个反常现象. 在30 K时, 直流磁记忆和缓慢测量 $\text{Bi}(\text{Fe}_{1-x}\text{Mn}_x)\text{O}_3$ 团簇的反常现象与冷冻的旋转玻璃系统有关.

**关键词:** 多铁性, 自旋玻璃体, 铁磁体

氧化锰三维微型超级电容器电极制备及电化学特性 ..... 209  
文春明<sup>a,b\*</sup>, 温志渝<sup>a,b</sup>, 尤政<sup>c</sup>, 王晓峰<sup>c</sup> (a. 重庆大学新型微纳器件与系统技术国家重点学科实验室, 重庆 400030; b. 重庆大学微系统中心, 重庆 400030; c. 清华大学精密仪器与机械学系, 北京 100084)

**摘要:** 为增强电容器的电荷贮存能力, 用MEMS技术在玻璃上制备高深宽比三维微电极结构, 以增大电极的表面积, 用阳极恒电压沉积在微电极表面沉积氧化锰作为电极活性物质, 用循环伏安和恒流充放电方法对所备的电极进行了电化学性能测试, 并用无结构的二维电极进行对比实验. 结果表明, 三维电极结构能有效增强电容器的电荷贮存能力, 在1.0 mA/cm<sup>2</sup>的充放电密度下, 三维电极的单位底面积比电容达17.88 mF/cm<sup>2</sup>, 是相应二维电极的7倍.

**关键词:** 微型超级电容器, MEMS, 三维微电极, 二氧化锰

在太阳光照射和不外加酸下TiO<sub>2</sub>双功能催化剂光催化还原Cr(VI)离子 ..... 214  
石富城, 汪文栋, 黄伟新\* (中国科学技术大学微尺度物质科学国家实验室, 能量转换材料中国科学院重点实验室, 化学物理系, 合肥 230026)

**摘要:** 利用硫酸氧钛铵的热分解控制制备了氮和硫共同掺杂的TiO<sub>2</sub>双功能光催化剂. TiO<sub>2</sub>双功能光催化剂同时具备光催化性能和较强的Brønsted酸性, 因此能够在太阳光照射和不外加酸下有效光催化还原Cr(VI)离子. 其光催化还原Cr(VI)离子的活性要优于通过外加硫酸调节到等pH值和太阳光照射下P25光催化剂光催化还原Cr(VI)离子的活性.

**关键词:** 光催化还原Cr(VI)离子, TiO<sub>2</sub>, Brønsted酸性, 双功能催化剂

聚环氧琥珀酸阻硫酸钙垢机理的分子动力学模拟 ..... 219  
曾建平<sup>a,b</sup>, 王凤贺<sup>c</sup>, 周臣<sup>d</sup>, 贡雪东<sup>a\*</sup> (a. 南京理工大学化学系, 南京 210094; b. 盐城工学院化学与生物工程学院, 盐城 224003; c. 南京师范大学环境科学与工程系, 南京 210046; d. 浙江省电力试验研究院, 杭州 310014)

**摘要:** 在不同温度不同水分子环境中对聚环氧琥珀酸(PESA)阻垢剂与硬石膏晶体主要生长面(001)的相互作用进行了分子动力学模

拟. 结果表明: 在323~343 K时, 不同水分子数中PESA都能有效阻止CaSO<sub>4</sub>垢的生长; 同一水分子数中, 不同温度下的结合能比较接近. 体系的结合能主要由库仑能变(包括离子键)提供, 硬石膏晶体中的Ca原子与PESA中的羧基O原子发生了成键作用. PESA中羧基O原子和水分子中H原子之间存在氢键作用, 而范德华相互作用有助于该PESA-H<sub>2</sub>O-CaCO<sub>3</sub>相互作用体系的形成. O(PESA的羧基)-H(H<sub>2</sub>O)、O(CaSO<sub>4</sub>)-H(H<sub>2</sub>O)和O(CaSO<sub>4</sub>)-H(PESA)原子对的径向分布函数表明, 溶剂分子对聚环氧琥珀酸阻硫酸钙的阻垢性能有影响.

**关键词:** 聚环氧琥珀酸, 硫酸钙, 分子动力学, 结合能, 径向分布函数

CdS纳米带和纳米锯的热蒸发法的合成和光学性质研究 ..... 226  
彭智伟<sup>a\*</sup>, 邹炳锁<sup>b</sup> (a. 广州大学物理与电子工程学院, 广州 510006; b. 湖南大学微纳光电器件及应用教育部重点实验室, 长沙 410082)

**摘要:** 利用氢气辅助的一步热蒸发法, 在镀有金膜的硅片上制备出大量的CdS纳米结构. CdS纳米结构由纤锌矿结构的CdS纳米带和纳米锯组成. 研究表明沉积温度对CdS纳米结构的形貌和尺寸具有重要影响. 用气-液-固和气-固复合生长机理解释了CdS纳米结构的形成过程. 光致发光测试表明CdS纳米带和纳米锯均发射出波长为512 nm的很强的绿色发光峰, 对应于CdS的带-带跃迁. 同时对CdS纳米结构的光波导性质也进行了观察和讨论.

**关键词:** CdS纳米结构, 热蒸发, 光致发光, 光波导

Au-CdSe纳米异质结在Au(111)表面上的分散与STM表征 ..... 231  
高博, 邝艳敏, 廖源\*, 董振超\* (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:** 研究单个Au-CdSe纳米异质结在经过表面修饰的Au(111)上的分散并进行STM表征. 发现衬底表面的自组装分子层的顶端功能基团对于形成良好的异质结分散状态非常重要. STM表明, 巯基和羧酸基都能与异质结的Au纳米颗粒部分形成强烈的相互作用, 从而将异质结有效地抓住, 避免了团聚现象, 便于异质结形成孤立分散的样品结构. 还可以采用条件适中的氩离子溅射技术来清除样品表面残留的有机物, 从而得到较清晰的单个Au-CdSe纳米异质结的STM图像.

**关键词:** 金属-半导体纳米结构, 纳米颗粒的分散, 溅射清洗, 扫描隧道显微学, 等离激元-激子耦合

成分和拓扑形貌可控的氧化锌/氧化钛复合反蛋白石的合成及其光催化性能 ..... 235  
徐佼, 杨磊芳\*, 傅正平, 温美旺, 赵永勋 (中国科学技术大学材料科学与工程系, 中科院能量转换材料重点实验室, 合肥 230026)

**摘要:** 利用自组装胶体模板导向电沉积制备氧化锌反蛋白石, 利用液相沉积法在室温下制备复合氧化锌/氧化钛反蛋白石. 当对氧化锌反蛋白石进行20 min的液相沉积处理时, 可以获得具有非密堆积三维有序多孔结构的氧化锌/氧化钛复合反蛋白石. 当液相沉积时间达到60 min时, 则得到壁厚明显增强的纯氧化钛反蛋白石(TiO<sub>2</sub>-LPD60). 讨论了样品成分和拓扑形貌变化的机理. 紫外光催化性能的初步研究显示, 反蛋白石膜的光催化性能同时受到来自成分和拓扑形貌两方面的显著影响. 对比纯的氧化锌或者氧化钛反蛋白石, 尽管样品具有相似的反蛋白石壁厚, ZnO/TiO<sub>2</sub>复合反蛋白石被证实具有明显增强的光催化活性. 然而, 当反蛋白石壁厚从约52 nm增加到约90 nm时, TiO<sub>2</sub>-LPD60显示了最高的光催化活性.

**关键词:** 复合反蛋白石, 氧化钛, 氧化锌, 光催化, 液相沉积

$\beta$ -环糊精对含有十二烷基硫酸钠的甲基纤维素水溶液凝胶化行为的影响 ..... 242  
李化玉<sup>a</sup>, 郝翔<sup>a</sup>, 谢永军<sup>a</sup>, 杨海洋<sup>a\*</sup>, 刘合<sup>b</sup>, 罗建辉<sup>a</sup> (a. 中国科学技术大学化学与材料科学学院高分子科学与工程系, 合肥 230026; b. 中石油集团勘探开发研究院, 北京 100083)

**摘要:** 测定了甲基纤维素在SDS溶液、和SDS与 $\beta$ -CD混合溶液中的凝胶化温度, 讨论了SDS与MC之间疏水相互作用和SDS与 $\beta$ -CD之间包合作用对MC溶液凝胶化行为的影响. 结果表明, SDS与 $\beta$ -CD之间的包合作用远大于SDS与MC链上甲基之间疏水相互作用, 在 $\beta$ -CD存在下, SDS对MC溶液凝胶化行为的影响可以被完全屏蔽掉. 由此可以进一步计算出在MC存在下SDS与 $\beta$ -CD之间的包合比是1:1, 与在聚乙烯吡咯烷酮存在下的包合比完全一致, 但是与在带相反电荷聚电解质存在下的包合比并不同, 主要是因为SDS与MC相互作用的方式和与聚电解质相互作用的方式有着本质的区别.

**关键词:** 甲基纤维素, 十二烷基硫酸钠,  $\beta$ -环糊精, 凝胶化转变, 包合作用