

## Chinese Abstracts (中文摘要)

**CO<sub>2</sub>对790 nm附近水线的压力加宽和位移** ..... 1  
陆燕, 李新飞, 刘安雯\*, 胡水明 (中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室(筹), 合肥 230026)

**摘要:** 采用高灵敏的激光光腔衰荡光谱技术研究了CO<sub>2</sub>对<sup>16</sup>O水分子 $v^2+3v^3$ 振动带跃迁线的压力诱导效应. 为了抑制水的自碰撞效应, 水的压力在实验中低于0.5 Torr. 基于铷原子吸收线和超稳法布里-珀罗标准确定了跃迁谱线高达 $10^{-5}$  cm<sup>-1</sup>精度的绝对频率. 采用软碰撞模型对吸收线进行模拟, 获得了对应的线形参数.

**关键词:** 水, 二氧化碳, 压力诱导加宽, 压力诱导位移, 光腔衰荡光谱

**固态氨气基中CO的红外光谱** ..... 5  
吴磊, Ricardo Lambo\*, 谈艳, 刘安雯, 胡水明 (中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室(筹), 合肥 230026)

**摘要:** CO单体在固体N<sub>2</sub>基中在4.5~30 K范围内的红外吸收光谱. 基本的拉伸模式的吸收特征显示其基质诱导峰宽和位移呈现弱的温度依赖性. 随着基质的温度升高, 峰宽增加并且主要峰发生红移, 这可能与在N<sub>2</sub>基中CO旋转状态转变成近似于振动状态有关. 并用定量模型计算振动态之间的能量差异.

**关键词:** 声子耦合, 振动弛豫, 能隙定律

**对浸入水或甲醇中的石墨氧化物的理论研究** ..... 9  
耿皖皖, 赵文辉, 袁岚峰\* (中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室(筹), 合肥 230026)

**摘要:** 采用密度泛函理论优化了含水和不含水的石墨氧化物的多种结构. 当层间没有水分子时, 优化的层间距在6 Å左右, 小于6.5~7 Å的实验值. 反之, 含水石墨氧化物的层间距和实验值符合很好. 基于优化的石墨氧化物结构, 用分子动力学方法模拟了水或甲醇中的石墨氧化物. 对于不含水的石墨氧化物, 水和甲醇分子不进入其层间. 而对于含水的石墨氧化物, 液体分子进入层间, 增大了层间距, 半定量地重复了实验现象.

**关键词:** 石墨氧化物, 浸入, 密度泛函理论, 分子动力学

**限制在疏水板中的新的六边形-四边三层冰结构** ..... 15  
贾敏, 赵文辉, 袁岚峰\* (中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室(筹), 合肥 230026)

**摘要:** 对限制在两个光滑的疏水板间的水进行了分子动力学模拟, 观察到了两种晶体结构, 都满足冰规则. 在1 GPa的压强和1.0 nm的板间距下获得的新的冰相是平坦的六边形-四边三层冰. 在此结构中, 靠近板的两层(外层)中的水分子形成六边形环, 中间层的水分子形成四边环. 对于外层的水分子, 其四个氢键中的三个在同一层中, 另一个氢键与中间层连接. 对于中间层的水分子, 四个氢键中的两个在同一层中, 而另外两个氢键与两个不同的外层相连. 虽然三层的形状不同, 但其面密度却接近相等. 另一种结构是在0.8 nm的板间距和100 MPa的侧向压力下获得的平坦的六边形双层冰. 模拟中的相变既有一阶相变, 也有连续相变.

**关键词:** 受限水, 分子动力学, 六边形-四边三层冰, 六边形双层冰

**O<sub>2</sub>、CO<sub>2</sub>和H<sub>2</sub>O在UN(001)表面化学吸附的密度泛函理论研究** ..... 20  
李如松<sup>a\*</sup>, 何彬<sup>a</sup>, 王飞<sup>a</sup>, 许鹏<sup>a</sup>, 王华<sup>b</sup> (a. 西安高新技术研究所, 洪庆镇, 西安 710025, b. 中国工程物理研究院, 绵阳 621900)

**摘要:** 采用广义梯度近似GGA, 修正Perdew-Burke-Ernzerhof交换-关联泛函, 以及周期性切片模型对O<sub>2</sub>、CO<sub>2</sub>和H<sub>2</sub>O在UN(001)表面的化学吸附行为进行非自旋极化水平的密度泛函理论计算. 在四个对称性化学位置条件下, 对化学吸附能与分子和UN(001)表面之间距离的关系曲线进行优化. 结果表明O<sub>2</sub>、CO<sub>2</sub>和H<sub>2</sub>O分子的最稳定吸附位置分别为桥式平行、空心平行和桥式H向上, 化学吸附能分别为14.127、4.421和5.736 kJ/mol. 从吸附物UN(001)表面角度考虑, O<sub>2</sub>与UN(001)表面之间的相互作用最高, 然后为CO<sub>2</sub>和H<sub>2</sub>O, 表明这些相互作用与吸附物的晶体结构相关. O<sub>2</sub>化学吸附导致UN(001)表面的N原子向基体内部迁移, 而CO<sub>2</sub>和H<sub>2</sub>O化学吸附对UN(001)表面分别具有中等和忽略不计的效应. 计算获得的态密度显示了化学吸附分子s、p轨道和U6d、U5f轨道之间的电子电荷转移行为.

**关键词:** 化学吸附, 密度泛函理论, 驰豫, 态密度

**GPCR A<sub>2A</sub>AR腺苷受体蛋白的激动剂结合及其诱导的蛋白活性开关构象变化** ..... 29  
庞雪芹, 刘建勇\* (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:** 运用分子动力学模拟, 研究了腺苷酸(激动剂)与A<sub>2A</sub>AR腺苷受体蛋白的相互作用和配体结合诱导的蛋白动力学变化. 识别了与腺苷酸结合力强于0.5 kcal/mol的关键基团: A63<sup>2.61</sup>, I66<sup>2.64</sup>, V84<sup>3.32</sup>, L85<sup>3.33</sup>, T88<sup>3.36</sup>, F168<sup>5.29</sup>, M177<sup>5.38</sup>, L249<sup>6.51</sup>, H250<sup>6.52</sup>和N253<sup>6.55</sup>. 观察到腺苷酸没有与L167<sup>5.28</sup>相互作用, 这一结果支持了L167<sup>5.28</sup>是抑制剂特异性结合位点, 不与激动剂结合. 未结合配体(激动剂或抑制剂)的单体A<sub>2A</sub>AR和腺苷酸结合后的A<sub>2A</sub>AR在构象上有三个不同功能性开关. 腺苷酸结合可以诱导A<sub>2A</sub>AR腺苷受体蛋白的构象调整, 使得三个功能性开关器件的构象与单体A<sub>2A</sub>AR不同.

**关键词:** A<sub>2A</sub>AR腺苷受体蛋白, 分子动力学, 腺苷酸, 特异性结合, 结构动力学, 二级结构

**转动激发对H+LiF→HF+Li的立体动力学影响的理论研究** ... 39  
解廷献<sup>a</sup>, 张莹莹<sup>b</sup>, 石英<sup>b\*</sup>, 金星<sup>b</sup> (a. 大连交通大学物理学院, 大连 116028; b. 吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130012)

**摘要:** 用准经典轨线方法在Aguado-Paniagua2(AP2)势能面上计算了反应物转动量子态对H+LiF→HF+Li反应立体动力学的影响. 给出了关于产物和反应物之间矢量相关的 $P(\theta_r)$ 和 $P(\phi_r)$ 的分布情况. 同时计算了四个极化微分反应截面. 结果表明转动量子态对H+LiF→HF+Li反应的矢量性质有很大影响. 还计算了H+LiF→HF+Li反应的反应几率.

**关键词:** 立体动力学, 准经典轨线, 极化微分反应截面

**双(2,2-二硝基丙基)甲缩醛的结构和爆轰性能的量子化学研究** ... 45  
闫淑卿<sup>a</sup>, 李小红<sup>b\*</sup> (a. 华北水利水电大学数学与信息科学学院, 郑州 450011; b. 河南科技大学物理与工程学院, 洛阳 471023)

**摘要:** 利用B3LYP/6-311+G(2d,p)方法对一种新型含能增塑剂双(2,2-二硝基丙基)甲缩醛进行几何优化, 计算了其红外光谱、生成焓和爆轰特性. 分析了最弱键的键离解能和键级并预测了目标化合物的热稳定性. 结果表明双(2,2-二硝基丙基)甲缩醛中的四个N-NO<sub>2</sub>键的键离解能都为164.38 kJ/mol. 表明目标化合物是一个热力学性能稳定的化合物. 以凝聚相生成焓和分子密度为基础, 采用Kamlet-Jacobs方法预测其爆速和爆压. 目标化合物的晶体结构属于P2<sub>1</sub>空间群.

**关键词:** 密度泛函理论, 爆轰特性, 热稳定性, 双(2,2-二硝基丙基)甲缩醛

**黄酮素激发态分子内质子转移耦合电荷转移反应的实验和理论研究** ..... 51

胡闪闪, 刘琨, 丁倩倩, 彭伟\*, 陈茂筠\* (大连理工大学物理与光电工程学院和高科技研究院, 大连 116024)

**摘要:** 通过稳态光谱实验和量子化学计算相结合, 研究了黄酮素激发态质子转移耦合电荷转移的反应. 实验和计算中S<sub>1</sub>态吸收峰的缺失表明S<sub>1</sub>态是暗态. S<sub>1</sub>暗态导致在实验中观察不到黄酮素在乙醇溶液中的荧光峰, 且固体的荧光峰很弱. 黄酮素分子的前线分子轨道和电荷差异密度表明S<sub>1</sub>态是电荷转移态, 然而S<sub>2</sub>态是局域激发态. 计算的黄酮素分子的势能曲线在激发态只有一个稳定点, 这表明了黄酮素激发态分子内质子转移的过程是一个无能垒的过程.

**关键词:** 激发态分子内质子转移, 分子内电荷转移, 含时密度泛函, 暗态, 黄酮素

**β-1,3,5,7-四硝基-1,3,5,7-四氮杂环辛烷热膨胀各向异性的量子化学计算与分子动力学模拟** ..... 57  
钱文, 张朝阳, 舒远杰\*, 熊鹰, 宗和厚, 张伟斌 (中国工程物理研究院化工材料研究所, 绵阳 621900)

**摘要:** 在303~383 K和NPT系综和COMPASS力场下对β-1,3,5,7-四硝基-1,3,5,7-四氮杂环辛烷(HMX)超晶胞初始结构的分子动力学模拟, 得到常压下各温度的晶体平衡构型并发现分子的堆积方式不变; 通过线性拟合求出线膨胀系数与实验值相近, 体现出明显的各向异性. 采用密度泛函理论方法对沿各晶轴方向膨胀率变化(100%~105%)的HMX单胞模型进行了总能计算, 得到的能量变化率体现各向异性并与热膨胀系数值关联, 建立了关联方程. 由此阐释了HMX晶体热膨胀各向异性的本质即特定的分子堆积模式.

**关键词:** 1,3,5,7-四硝基-1,3,5,7-四氮杂环辛烷, 热膨胀, 各向异性, 分子动力学模拟, 密度泛函理论方法

**从银电极上氢析出的温度效应得到的反应动力学启示** ..... 63  
康婧, 林楚红, 姚瑶, 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(筹), 化学物理系, 合肥 230026)

**摘要:** 利用循环伏安法研究了多晶银电极在0.1 mol/L HClO<sub>4</sub>溶液中氢析出反应的温度效应. 发现当从析氢起始电位负向扫描至零电荷电位(-0.4 V)时, 氢析出反应的表现活化能( $E_{a,app}$ )和指前因子( $A$ )均随着电势的负移而增大(对应的 $E_{a,app}$ 从24 kJ/mol增大至32 kJ/mol). 继续负向扫描至零电荷电位以后,  $E_{a,app}$ 随电势的负移而减小但 $A$ 不随电势变化. 推测 $E_{a,app}$ 和 $A$ 在零电荷电位前的反常变化来自于反应物和过渡态之间内能和熵值变化. 在零电荷电位以正电位, 电极附近的水分子以氧端吸附在电极表面上, 且水分子之间有氢键作用. 电势变化产生的能量主要用于使水分子脱附并使氢键网络改变. 在 $E > PZC$ 的电位区, 电位负移导致的正的熵效应(指前因子增加)补偿了活化能的升高导致的负效应, 从而显示反应的净电流随电位负移而增加. 结果表明溶剂的动力学和相关的熵因子项可能会对析氢这类涉及质子和电子转移的电极反应的动力学产生很大的影响.

**关键词:** 氢析出反应, 银电极, 温度效应, 活化能, 对称因子, 内能, 熵变

**第一性原理计算高压下金红石TiO<sub>2</sub>的结构不稳定性及热学性质** 69  
胡翠娥<sup>a,b</sup>, 曾召益<sup>a,b\*</sup>, 孔春阳<sup>a</sup>, 崔玉亭<sup>a</sup>, 张林<sup>b</sup>, 蔡灵仓<sup>b</sup> (a. 重庆师范大学物理与电子工程学院, 重庆 400047; b. 中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波与爆轰物理国防科技重点实验室, 绵阳 621900)

**摘要:** 采用第一性原理计算研究了金红石TiO<sub>2</sub>结构在高压下的不稳定性及热学性质. 计算的高压下结构参数和零压的声子色散曲线与实验数据十分吻合. 进一步模拟了在不同压力下的声子曲线, 在压力下, 声子曲线不断软化,  $\Gamma$ 点附近的振动频率不断减小直至虚频, 意味着结构的不稳定, 根据计算的不同压力下的弹性常数获得了其力学不稳定性, 结果表明金红石结构TiO<sub>2</sub>在压力高于17.7 GPa时变得不稳定. 根据准谐近似, 获得了金红石TiO<sub>2</sub>结构的热学性质, 计算结果与现有的实验数据相一致.

**关键词:** TiO<sub>2</sub>, 声子色散曲线, 热学性质, 密度泛函理论

**旋转异构和键长变化对溶液中FTC分子光谱性质的影响** ..... 75  
赵珂<sup>a</sup>, 韩广超, 张立立, 贾海洪 (山东师范大学物理与电子科学学院, 济南 250014)

**摘要:** 采用含时密度泛函理论结合极化连续模型计算了不同溶剂环境下FTC分子各旋转异构体的单光子吸收光谱. 结果显示在气态和溶剂中, 各异构体的最大吸收波长均存在大约30 nm的差别. 在不同溶剂中, 各异构体的能量次序和相应的玻尔兹曼统计分布几率发生了较大变化. 基于Hartree-Fock方法优化的结构, 计算了玻尔兹曼统计平均吸收光谱, 结果与实验符合得很好. 计算表明, 对于所研究的分子体系, 键长变化对分子的光谱性质有重要影响.

**关键词:** 旋转异构, 键长变化, 单光子吸收, 极化连续模型

**Ar<sup>+</sup>, He<sup>+</sup>, S<sup>+</sup>离子轰击n-InP单晶表面的机理研究** ..... 82  
胡靖宇, Waqas Mahmood, 赵清\* (北京理工大学物理学院, 北京 100081)

**摘要:** 通过X射线光电子能谱和低能电子衍射实验研究了10~180 eV的Ar<sup>+</sup>、He<sup>+</sup>、S<sup>+</sup>离子轰击n-InP(100)表面, 发现S<sup>+</sup>离子轰击可以产生In-S组分, 减轻离子轰击对表面的物理损伤. 对于Ar<sup>+</sup>离子轰击后的表面, 经过S<sup>+</sup>离子处理和加热过程以后, 表面损伤得到了修复, 最终得到了2×2的InP表面, 进一步验证了S<sup>+</sup>离子对InP表面的修复作用.

**关键词:** 低能离子轰击, 加热, 表面损伤, 费米能级

**氧化石墨烯在缺氧氧化锌薄膜表面的自发分裂** ..... 87  
刘金养<sup>a</sup>, 蔡洪冰<sup>b</sup>, 丁怀义<sup>a</sup>, 张琨<sup>b</sup>, 潘楠<sup>b</sup>, 王晓平<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(筹), 合肥 230026)

**摘要:** 第一次从实验上展现了氧化石墨烯在缺氧氧化锌薄膜表面的自发分裂, 即完整的氧化石墨烯片会自发分裂成许多小片. 此现象的可能机制是: 氧化石墨烯表面存在链状的环氧基团, 缺氧氧化锌薄膜表面的氧空位能够吸收氧化石墨烯表面的环氧基团, 影响氧化石墨烯表面的环氧基团链的稳定性, 导致环氧基团链自发打开, 从而使完整的氧化石墨烯片破裂成很多小片.

**关键词:** 氧化石墨烯, 环氧基, 氧化锌薄膜, 氧空位, 光响应

**常压连续反应性萃取法由预处理生物质制备乙酰丙酸** ..... 92  
范明慧, 闫立峰\* (中国科学技术大学化学物理系和安徽省生物质洁净能源实验室, 合肥 230026)

**摘要:** 采用双相联系流反应性萃取技术实现常压下小麦秸秆向乙酰丙酸的转化, 其中生物质在水相中完成降解, 形成乙酰丙酸, 而后比水

密度大的有机相作为乙酰丙酸的萃取相, 把生成的乙酰丙酸萃取到有机相, 并经过虹吸到收集瓶中, 有机相经蒸馏可反复使用, 实现了预处理生物质到乙酰丙酸的高效转化, 乙酰丙酸最大的产率为30.66%.

**关键词:** 生物质, 反应性萃取, 乙酰丙酸, 常压

**径向生长的具有分级结构的四氧化三钴微晶及其在气体传感上的应用** ..... 99

于欣欣<sup>a</sup>, 刘先松<sup>a</sup>, 吴明在<sup>a\*</sup>, 孙兆奇<sup>a</sup>, 李广<sup>a</sup>, 陈效双<sup>b</sup> (a. 安徽大学物理与材料科学学院, 合肥 230039, b. 中国科学院上海技术物理研究所, 上海 200083)

**摘要:** 通过在水热合成后追加退火处理, 制备了径向生长的具有分级结构的树枝状三维Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>晶体, 并用X射线衍射仪、扫描电子显微镜和透射电子显微镜对其结构和形貌进行了表征. 在110 °C对其气体探测性能的研究表明这种Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>分级结构对氨气有较高的探测灵敏度和响应速度(10 s), 性能稳定并具有可重复性. 同时, 还在较低的探测温度下对酒精、丙酮和苯进行了气敏探测.

**关键词:** Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>, 分级, 气体传感, 灵敏度

**氮化硅新相P6和P6'的理论研究: 一种研究陶瓷材料的新工具** 103  
余本海, 陈东\* (信阳师范学院物理电子工程学院, 信阳 464000)

**摘要:** 在原子尺度上构建模型, 采用密度泛函理论结合准谐近似研究了氮化硅新相(P6和P6'相)的点阵常数、弹性常数和弹性模量. 并使用 $\beta$ -Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>作基准材料来测试计算结果的准确性. 研究发现 $\beta$ -Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>的晶胞常数和弹性常数与实验值吻合相当好. 研究了P6和P6'相在30~55 GPa的各向异性因子、脆性和力学稳定性, 结果表明两相属于金属性和脆性材料, 且晶体的脆性和各向异性都随着压强的升高而增大.  $\beta$ 相在40 GPa和300 K时会转变成P6'相. 当压强继续升高到53.2 GPa时, P6'相又转化成 $\delta$ 相. 同时研究了氮化硅的热容、体积和体模量等性质随温度的变化规律.

**关键词:** 第一性原理, 氮化物, 脆性, 相图

**窄带系聚合物APFO3的激发态光物理特性** ..... 109

曲丽丽<sup>a</sup>, 王英惠<sup>a,b\*</sup>, 康智慧<sup>a</sup>, 马光<sup>b</sup>, 张汉壮<sup>a\*</sup> (a. 吉林大学物理学院, 飞秒激光实验室, 长春 130012, b. 吉林大学超分子结构与材料国家重点实验室, 长春 130012)

**摘要:** 化学计算证实了光致激发窄带系聚合物APFO3后, 会发生链内电荷转移(ICT)过程, 同时这一特性还影响了吸收光谱中的第一吸收带. 瞬态吸收结果再一次表明了当聚合物在单分散体系中确实存在ICT特性, 而且这种特性会同振动弛豫竞争. 在聚集态中, 受链间相互作用的影响, ICT特性会消失, 而且激子弛豫过程将在光致激发后的弛豫过程中占据主导地位. 混有PC<sub>61</sub>BM的APFO3薄膜的光致激发动力学显示, 当PC<sub>61</sub>BM的含量超过50%时, 激子解离已经达到饱和. 基于此异质结的光伏器件性能显示PC<sub>61</sub>BM的含量高于50%以后, 光电流的增幅也很小.

**关键词:** 共轭聚合物, 瞬态吸收光谱, 链内电荷转移

**利用原子力显微镜研究在单分子水平上DNA与组蛋白的相互作用** .

..... 115  
刘玉颖<sup>a\*</sup>, 王鹏业<sup>b</sup>, 窦硕星<sup>b</sup>, 吕洪凤<sup>a</sup>, (a. 中国农业大学理学院, 北京 100083, b. 中国科学院物理研究所软物质物理实验室, 北京 100190)

**摘要:** 核小体是DNA被压缩成染色质的第一级压缩结构. 为了更深刻描述DNA与组蛋白的相互作用, 利用透析方法将DNA和组蛋白构建核小体, 并且应用原子力显微镜进行单分子水平上的观察. 实验结果表明利用透析方法得到了核小体的“串珠型排列”, 并且对在两种不同的结合条件下DNA与组蛋白的相互作用进行了观察和比较.

**关键词:** DNA, 组蛋白, 原子力显微镜, 单分子, 透析

**具有缺陷模的氧化铝光子晶体的光学传感性能** ..... 121

闫鹏<sup>a,b,c</sup>, 费广涛<sup>c\*</sup>, 李惠<sup>a,c</sup>, 商国亮<sup>c</sup>, 吴兵<sup>c</sup>, 张立德<sup>c</sup> (a. 中国科学技术大学物理系, 合肥 230026, b. 滨州医学院, 烟台 264300, c. 中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所, 中国科学院材料物理重点实验室, 安徽省纳米材料与纳米技术重点实验室, 合肥 230031)

**摘要:** 采用在周期性氧化电压信号中插入恒压波形的方法成功制备了具有缺陷模的一维氧化铝光子晶体. 这种晶体的透射光谱研究表明, 缺陷的厚度对缺陷模的透过率具有显著影响, 当缺陷厚度在180 nm时, 光子禁带内部出现透过率为55%、半峰宽约为18 nm的缺陷模. 该缺陷模能够对进入到氧化铝孔道内部的液体物质做出响应, 其位置与液体的折射率线性相关.

**关键词:** 纳米材料, 多孔材料, 氧化铝, 光子晶体, 传感器