

[Article]

www.whxb.pku.edu.cn

## Fe-AlPO<sub>4</sub>-5 分子筛的共振拉曼光谱

孙科举<sup>1,2</sup> 李微雪<sup>1,\*</sup> 冯兆池<sup>1</sup> 李 灿<sup>1,\*</sup><sup>(1)</sup>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, 辽宁 大连 116023; <sup>(2)</sup>中国科学院研究生院, 北京 100049)

**摘要:** 利用周期性密度泛函的方法, 将过渡金属杂原子取代的硅基分子筛的共振拉曼计算结果成功推广到磷铝分子筛体系中. 根据对 Fe-ZSM-5 共振拉曼光谱特点的推广和对 Fe-AlPO<sub>4</sub>-5 振动光谱的理论计算结果, 预测在 Fe-AlPO<sub>4</sub>-5 的共振拉曼光谱的 1190、1130、1000–1050 和 600 cm<sup>-1</sup> 位置附近将出现四条显著的谱带. 实验的 Fe-AlPO<sub>4</sub>-5 的共振拉曼光谱中确实观察到四条与骨架 Fe 物种相关的谱带分别位于 1210、1130、1050 和 630 cm<sup>-1</sup> 处, 与预测结果一致. 另外发现含铁磷铝分子筛的共振振动频率要高于相应的含铁硅基分子筛体系的振动频率, 这种频率的差异主要是氧在不同分子筛体系中受力的力常数不同引起的. 另外磷氧四面体和铝氧四面体之间的电荷吸引作用对振动频率也有较大的影响.

**关键词:** 密度泛函理论; Fe-AlPO<sub>4</sub>-5; 共振拉曼光谱

**中图分类号:** O641

## Resonance Raman Spectrum of Fe-AlPO<sub>4</sub>-5 Zeolite

SUN Ke-Ju<sup>1,2</sup> LI Wei-Xue<sup>1,\*</sup> FENG Zhao-Chi<sup>1</sup> LI Can<sup>1,\*</sup><sup>(1)</sup>State Key Laboratory of Catalysis, Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Dalian 116023, Liaoning Province, P. R. China; <sup>(2)</sup>Graduate University of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, P. R. China)

**Abstract:** Resonance Raman spectrum results from the study of silica zeolites that contain transition metals by density functional theory (DFT) calculations were extended successfully to an aluminum phosphate zeolite system. Based on the study of the resonance Raman spectrum of Fe-ZSM-5 and DFT calculations of Fe-AlPO<sub>4</sub>-5, we predicted the presence of four vibrational bands at 1190, 1130, 1000–1050 and 600 cm<sup>-1</sup> in the resonance Raman spectrum of Fe-AlPO<sub>4</sub>-5. Experimentally those four bands were found at 1210, 1130, 1050, and 630 cm<sup>-1</sup> in the Raman spectrum of Fe-AlPO<sub>4</sub>-5, excited by a 244 nm laser, and were assigned to the framework Fe species. The resonance Raman spectrum of Fe-AlPO<sub>4</sub>-5 is similar to that of the Fe-ZSM-5 zeolite since both zeolites have similar tetrahedrally coordinated Fe species in the framework. However, the vibrational frequencies of Fe-AlPO<sub>4</sub>-5 are higher than those of Fe-ZSM-5 because of the higher force constant of oxygen in Al—O—P than in Si—O—Si. Furthermore, the effect of the electrostatic attraction between the PO<sub>4</sub> tetrahedron and the AlO<sub>4</sub> tetrahedron is found to be important to the vibrational frequencies.

**Key Words:** Density functional theory; Fe-AlPO<sub>4</sub>-5; Resonance Raman spectroscopy

分子筛材料中除了传统的硅铝分子筛家族之外, 还有磷酸铝家族、磷酸锌家族、磷酸镓家族、硫酸钛家族等大量具有微孔结构的非硅基分子筛, 另外还有混合型的如硅磷酸铝家族等. 这些分子筛家族因其骨架元素种类与孔道结构的多样化, 往往表现

出一些特殊的性质使其在吸附分离、催化和先进材料等领域具有广阔的应用空间<sup>[1–5]</sup>. 在这些分子筛材料中引入过渡金属元素后, 在氧化还原催化、手性催化与大分子催化反应方面显示出重要的应用前景, 因此得到了人们的广泛关注<sup>[6–8]</sup>.

Received: November 25, 2008; Revised: December 24, 2008; Published on Web: February 10, 2009.

\*Corresponding authors. Email: wxli@dicp.ac.cn, canli@dicp.ac.cn; Tel: +86411-84379996, +86411-84379070.

国家自然科学基金(20621063, 20772123 和 20733008)资助项目

含过渡金属的硅基分子筛如 Fe-ZSM-5、Cu-ZSM-5、TS-1 等, 在选择性催化氧化反应中往往表现出高活性和选择性. 但由于分子筛中过渡金属含量一般较低、成分复杂等原因, 则用一般表征手段很难对分子筛中的过渡金属杂原子进行清晰的表征. 最近, Li<sup>[9]</sup>等通过将紫外共振拉曼技术与密度泛函理论计算相结合, 系统研究了硅基分子筛中骨架过渡金属物种的结构、对称性以及特征光谱之间的关系, 在此基础上对测量的拉曼光谱进行了归属. 迄今为止, 对非硅基杂原子分子筛共振拉曼光谱的归属和理论研究还未见报道. 本文以 Fe- $\text{AlPO}_4\text{-5}$  为非硅基杂原子分子筛的代表对此展开了相应的理论研究, 将过渡金属骨架取代的硅基分子筛的拉曼光谱结果成功推广应用到磷铝分子筛体系中.

## 1 计算方法及模型

计算 Fe- $\text{AlPO}_4\text{-5}$  分子筛所用模型是周期性模型, 软件是 VASP<sup>[10-13]</sup>. 通过解 Kohn-Sham 方程得到体系的总能. 电子的交换关联相互作用采用自恰的 GGA 类型的 PW91 泛函<sup>[14]</sup>. 采用了 PAW 势<sup>[15,16]</sup>, 从而大大减少平面波数, 相应的平面波动能截断为 300 eV. 由于 Fe 原子的引入, 在计算中考虑了自旋极化的影响. 由于计算选取的体系比较大(晶胞参数  $a=b=1.3726$  nm,  $c=1.6968$  nm), 在计算中只考虑了布里渊区  $\Gamma$  点. 在结构弛豫时, 当每个原子(或离子)上的力都小于  $0.7$  eV·nm<sup>-1</sup> 时, 即认为整体结构达到能量最低点. 采用有限差分法计算 Fe- $\text{AlPO}_4\text{-5}$  的振动频率. 有限差分法就是将体系的每一个原子(或离子)在笛卡尔坐标的各个方向上进行适当的微扰(本文中取的值是  $0.004$  nm), 由此计算出原子的受力情况和 Hessian 矩阵(Hessian 矩阵是体系能量对于原子位置的二阶导数). Hessian 矩阵的不同的本征值对应于实验中观察到的不同的振动频率, Hessian 矩阵的每个本征值所对应的本征矢量对应于该振动频率所对应的振动模式. 在计算频率的时候, 晶胞的大小和形状是固定的.

$\text{AlPO}_4\text{-5}(\text{Al}_{12}\text{P}_{12}\text{O}_{48})$  属于六方晶系, 空间点群为  $P6cc$ , 晶胞参数  $a=1.3726$  nm,  $c=0.8484$  nm, 结构如图 1 所示. 为了避免由于晶胞  $c$  方向较小, 导致由周期性所致的相邻晶胞内替代的 Fe 原子之间产生强烈的相互作用而引入的人为误差, 将计算的  $\text{AlPO}_4\text{-5}$  分子筛晶胞在  $c$  方向扩大了一倍, 形成一个超晶胞, 这样晶胞三个方向的分量都超过了 1 nm. 在

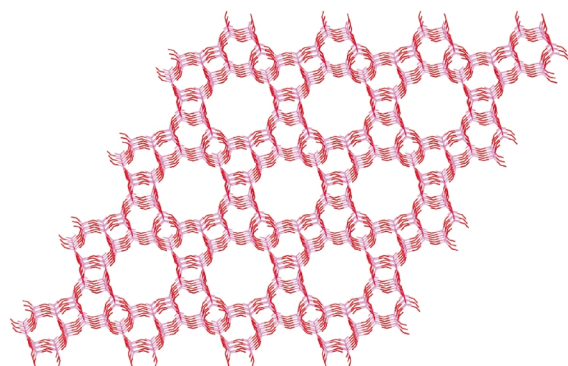


图 1  $\text{AlPO}_4\text{-5}(\text{AFI})$  的骨架结构  
Fig.1 Structure of  $\text{AlPO}_4\text{-5}(\text{AFI})$

$\text{AlPO}_4\text{-5}(\text{AFI})$  结构中无论是 P 还是 Al 都只有一种对称位, 因此只考虑了在一个超晶胞中一个  $\text{Fe}^{3+}$  取代一个  $\text{Al}^{3+}$  的情况. 在 Fe- $\text{AlPO}_4\text{-5}$  体系中, Fe 和 Al 都处于三价, 因此当一个  $\text{Al}^{3+}$  被  $\text{Fe}^{3+}$  取代后, 体系仍保持电中性, 因此不需要引入额外的补偿电荷.

为了进一步考察氧不对称伸缩振动, 采用了团簇模型进行研究, 所使用的软件为 Gaussian 03<sup>[17]</sup>, 采用的基组为 6-31g(d)<sup>[18,19]</sup>, 泛函为 B3LYP<sup>[20-22]</sup>. 对于  $\text{SiH}_3\text{-O-SiH}_3$  体系和  $\text{PH}_3\text{-O-AlH}_3$  体系, 电荷为零, 自旋多重度为 1; 对于  $\text{FeH}_3\text{-O-SiH}_3$  体系, 电荷为 -1, 基态自旋多重度为 6; 对于  $\text{FeH}_3\text{-O-PH}_3$  体系, 电荷为零, 基态自旋多重度也为 6. 在结构优化的时候, 所有的原子位置都不固定, 但是所有体系中金属-氧-金属之间的夹角固定为  $180^\circ$ .

## 2 结果与讨论

根据对 Fe-ZSM-5 分子筛中骨架 Fe 的共振拉曼光谱研究<sup>[9]</sup>, 骨架四配位过渡金属的拉曼光谱一般有四个特征谱带, 对 Fe-ZSM-5 而言分别位于  $516$ 、 $1005$ 、 $1115$  和  $1165$  cm<sup>-1</sup>. 其中  $516$  cm<sup>-1</sup> 归属为  $\text{Fe}(\text{OSi})_4$  的全对称伸缩振动( $\nu_2(A_1)$ ),  $1005$  cm<sup>-1</sup> 归属为  $\text{FeO}_4$  的非全对称伸缩振动( $\nu_6(T_2)$ ),  $1115$  cm<sup>-1</sup> 归属为  $\text{FeO}_4$  的全对称伸缩振动( $\nu_1(A_1)$ ),  $1165$  cm<sup>-1</sup> 归属为  $\text{FeO}_4$  四面体邻近的 Si—O—Si 的不对称伸缩振动引发的  $\text{FeO}_4$  的全对称伸缩振动( $\nu_6(A_1)$ ). 振动模式  $\nu_2(A_1)$  和  $\nu_1(A_1)$  不同之处在于  $\nu_1(A_1)$  中 O 和 Si 的振动方向是相反的, 而在  $\nu_2(A_1)$  中 O 和 Si 的振动方向是相同的. 从另一个角度看, 也可以说是  $\nu_1(A_1)$  模式中振动单元为 O, 而在  $\nu_2(A_1)$  中振动单元为 OSi.

如果两个体系具有相同的空间结构, 如  $\text{CCl}_4$  和  $\text{CH}_4$  体系都具有  $T_d$  对称性, 则它们将具有相同的振动模式. 但因 Cl 和 H 的原子质量和力常数不同, 其对

应的振动频率会有所不同. 如果以Fe周围的局域环境看, Fe-ZSM-5和Fe-AlPO<sub>4</sub>-5都具有Fe(OSi)<sub>4</sub>(或Fe(OP)<sub>4</sub>)四面体结构, 因此它们也将具有相近的振动模式. 对于拉曼光谱, 特别是对于共振拉曼光谱, 其强度主要取决于振动模式的对称性<sup>[23-25]</sup>, 因此根据对Fe-ZSM-5分子筛共振拉曼光谱的研究结果, 可以推断, 在Fe-AlPO<sub>4</sub>-5分子筛的共振拉曼光谱中也将会出现类似的四条特征谱带, 但谱带的具体位置(振动频率)可能会和Fe-ZSM-5分子筛的结果不同.

根据上述分析, 用周期场 DFT 的方法计算了 Fe-AlPO<sub>4</sub>-5 分子筛中四种振动模式对应的振动频率, 计算的结果如表 1 所示. 实验测量的 244 nm 激光激发下 Fe-AlPO<sub>4</sub>-5 的拉曼光谱来自于文献[26]. 其中 630、1050、1130 和 1210 cm<sup>-1</sup> 的谱峰被认为与磷铝分子筛骨架铁物种有关. 比较理论计算与实验测量的结果, 发现两者符合得很好. 由此可以将 Fe-AlPO<sub>4</sub>-5 的共振拉曼光谱进行明确的归属. 630 cm<sup>-1</sup> 归属为 Fe(OP)<sub>4</sub> 的全对称伸缩振动  $\nu_2(A_1)$ , 1050 cm<sup>-1</sup> 归属为 FeO<sub>4</sub> 的非全对称伸缩振动  $\nu_6(T_2)$ , 1130 cm<sup>-1</sup> 归属为 FeO<sub>4</sub> 的全对称伸缩振动  $\nu_1(A_1)$ , 1210 cm<sup>-1</sup> 归属为 FeO<sub>4</sub> 四面体邻近的 P—O—Al 的不对称伸缩振动引发的 FeO<sub>4</sub> 的全对称伸缩振动  $\nu_6(A_1)$ .

在将 Fe-ZSM-5 的结果推广应用到 Fe-AlPO<sub>4</sub>-5 的过程中, 发现只要过渡金属骨架替代的分子筛具有类似的四面体结构, 它们将具有类似的特征光谱: 四条谱带, 三高一低(如图 2 所示). 也就是存在四条特征谱带, 三条处在较高的振动频率(1000 cm<sup>-1</sup> 附近), 一条处于较低的振动频率(600 cm<sup>-1</sup> 附近). 由此, 只要在含过渡金属的分子筛的共振拉曼光谱中观察到类似的光谱特征, 就可以推断出过渡金属以四配位的形式位于分子筛骨架上.

比较 Fe-ZSM-5 和 Fe-AlPO<sub>4</sub>-5 分子筛实验的特征拉曼光谱的频率(表 1), 发现相比于 Fe-ZSM-5 分子筛的四条特征光谱的振动频率, Fe-AlPO<sub>4</sub>-5 的振动频率都向高波数有一个明显的位移. 并且发现这个位移并非等比例或等间距位移, 各个谱峰的位移

表 1 理论和实验的 Fe-AlPO<sub>4</sub>-5 的拉曼振动频率(cm<sup>-1</sup>)  
Table 1 Calculated and experimental vibration frequencies (cm<sup>-1</sup>) of Fe-AlPO<sub>4</sub>-5

	$\nu_6(A_1)$	$\nu_1(A_1)$	$\nu_6(T_2)$	$\nu_2(A_1)$
Fe-AlPO <sub>4</sub> -5 theory	1192	1131	1053, 1027, 1003	602
experiment <sup>[26]</sup>	1210	1130	1050	630
Fe-ZSM-5 experiment <sup>[9]</sup>	1165	1115	1005	516

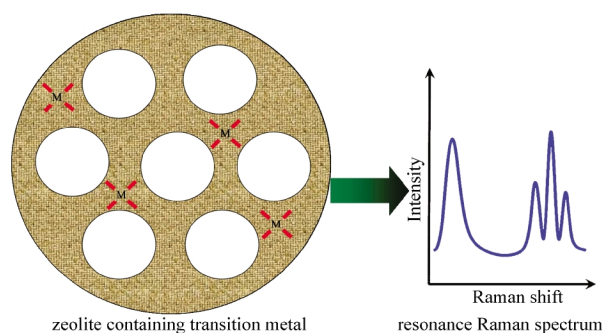


图 2 骨架过渡金属杂原子分子筛的特征共振拉曼光谱示意图

Fig.2 Scheme for resonance Raman spectrum of zeolite containing transition metal

有较大差别. 其中对于  $\nu_6(A_1)$  模式和  $\nu_6(T_2)$  模式, 位移了 45 cm<sup>-1</sup>, 而对于  $\nu_1(A_1)$  仅位移了 15 cm<sup>-1</sup>, 对于  $\nu_2(A_1)$  模式位移了 114 cm<sup>-1</sup>.

对于实际体系中 Fe-AlPO<sub>4</sub>-5 分子筛的拉曼光谱频率与 Fe-ZSM-5 分子筛比较, 整体向高波数方向移动, 猜测是由于氧在磷铝分子筛中受到的力对应的力常数大于氧在硅基分子筛中对应的力常数. 为了证明这个猜测, 用团簇模型计算了几种模型体系中氧的不对称伸缩振动, 模型结构和相应金属—氧—金属的不对称伸缩频率如图 3 所示. 比较 P—O—Al 体系和 Si—O—Si 体系的振动频率, 发现氧在 P—O—Al 体系中的不对称伸缩振动频率要比氧在 Si—O—Si 体系中的高, 这说明氧在磷铝分子筛中受到的力对应的力常数确实大于氧在硅基分子筛中对应的力常数, 从而解释了 Fe-AlPO<sub>4</sub>-5 分子筛的拉曼光谱的频率相对于 Fe-ZSM-5 分子筛整体向高波数方向移动的原因.

进一步比较几种团簇模型体系中的 Si—O—Fe

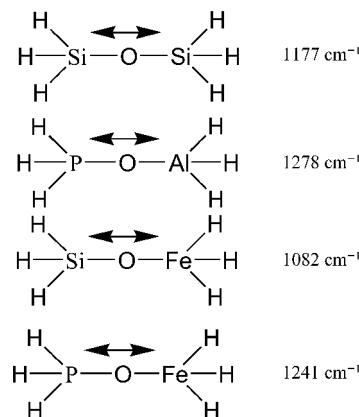


图 3 几种团簇模型体系的氧的不对称伸缩振动  
Fig.3 Asymmetry stretch vibrations of oxygen in several cluster model systems

体系和 Si—O—Si 体系, 或者比较 P—O—Al 体系和 P—O—Fe 体系, 发现在 Fe 掺入体系之后拉曼光谱的频率都向低波数有一定的位移. 这说明体系骨架位引入了杂原子 Fe 之后, 新形成的振动谱带( $\nu_1(A_1)$ )将出现在原始谱带( $\nu_0(A_1)$ )的低频的方向. 这在 Fe-AlPO<sub>4</sub>-5 分子筛体系和 Fe-ZSM-5 体系中都得到了验证. 1210 cm<sup>-1</sup> 起源于 P—O—Al 的不对称伸缩振动引起的 FeO<sub>4</sub> 的对称伸缩振动, 因此它的振动频率就代表了 Fe-AlPO<sub>4</sub>-5 分子筛中 P—O—Al 的不对称伸缩振动的频率. 而 Fe 掺杂后由氧在 P—O—Fe 中不对称伸缩振动频率位于 1130 和 1050 cm<sup>-1</sup>, 低于 P—O—Al 的振动频率. 在 Fe-ZSM-5 体系中也有类似的结果. 不过由此分析过程发现, 理论上如果存在某种过渡金属 M 同晶取代后形成的 M—O—P (或 M—O—Si) 的振动频率高于 Al—O—P (或 Si—O—Si) 的振动频率, 将可能发现  $\nu_1(A_1)$  的振动频率高于  $\nu_0(A_1)$  的现象. 不过, 在大部分情况下, 过渡金属进入骨架后, 形成的 M—O—P (或 M—O—Si) 的热稳定性低于 Al—O—P (或 Si—O—Si), 其中氧受到的力的力常数也变小, 对应的不对称伸缩振动的频率也将变低. 因此大部分情况下看到的还是  $\nu_0(A_1)$  的振动频率高于  $\nu_1(A_1)$  的现象.

$\nu_0(A_1)$ 、 $\nu_1(A_1)$  和  $\nu_6(T_2)$  振动模式在 Fe-AlPO<sub>4</sub>-5 分子筛中的振动频率相对于在 Fe-ZSM-5 分子筛中的振动频率的位移不足 50 cm<sup>-1</sup>, 而  $\nu_2(A_1)$  振动模式对应的位移高达 114 cm<sup>-1</sup>. 这种明显的差异应归因于基本的振动单元不同. 在  $\nu_0(A_1)$ 、 $\nu_1(A_1)$  和  $\nu_6(T_2)$  等振动中, 虽然振动模式略有不同, 但其最基本的振动单元均为氧的不对称伸缩振动. 只是氧两端连接的金属不同, 导致最后表现出的振动频率有所差异. 但是在  $\nu_2(A_1)$  振动模式中, O 和 P (或 O 和 Si) 振动同步, 也就是可以认为它们紧紧束缚在一起, 成为一个振子来参与这个振动, 所以最基本的振动单元为 OP (或 OSi). 因此在  $\nu_2(A_1)$  振动模式中对这个振动频率有贡献的力, 除了 Fe—O 之间的力之外还有 Fe—P (或 Fe—Si) 之间的力的作用. 在硅基分子筛中, 硅离子或铁离子由于都带有正电荷因而主要表现为排斥的相互作用. 但在磷铝分子筛中, 除了相邻阳离子之间也存在这种排斥作用之外, 还存在一种强烈的相互吸引的作用. 在磷铝分子筛中, AlO<sub>4</sub> 四面体 (或 FeO<sub>4</sub> 四面体) 带一定量的负电荷, 而 PO<sub>4</sub> 四面体则带一定的正电荷, 因此 AlO<sub>4</sub> 四面体 (或 FeO<sub>4</sub> 四面体) 和 PO<sub>4</sub> 四面体之间存在一种静电荷吸引力. 而在硅基分子筛

中, 由于 SiO<sub>4</sub> 四面体几乎不带电, 因此不存在这种吸引作用. 因此, 正是这种相邻四面体之间的吸引作用使铁磷之间相对于铁硅之间有更强的吸引作用. 所以 Fe—(OP) 之间的力常数要大于 Fe—(OSi) 之间的力常数. 而 P 和 Si 的原子质量相差不多, 所以 Fe—OP 的振动频率远大于 Fe—OSi 的振动频率, 相应的  $\nu_2(A_1)$  振动模式对应的位移高达 114 cm<sup>-1</sup>.

### 3 结论

本工作将过渡金属骨架取代的硅基分子筛的拉曼光谱的结果, 成功推广应用到磷铝分子筛体系中. 发现只要过渡金属骨架替代的分子筛具有类似的四面体结构, 将具有类似的特征光谱. 相对于硅基分子筛, 磷铝分子筛的振动频率都向高波数方向有一定程度的位移, 位移的根本原因在于氧在 Al—O—P 中的振动频率高于氧在 Si—O—Si 中的振动频率. 另外磷氧四面体和铝氧四面体由于带有异种电荷因而存在的相互作用也是  $\nu_2(A_1)$  振动模式向高波数方向移动的原因. 对骨架替代的硅基和磷铝分子筛的拉曼光谱的研究有助于了解其它类似的分子筛体系骨架振动信息, 进而理解分子筛骨架位活性中心的结构及其在催化中的功能.

### References

- 1 Wilson, S. T.; Lok, B. M.; Messina, C. A.; Cannan, T. R.; Flanigen, E. M. *J. Am. Chem. Soc.*, **1982**, **104**: 1146
- 2 Yokomori, Y.; Kawachi, Y. *Zeolite*, **1995**, **15**: 637
- 3 Bruckner, A.; Lohse, U.; Mehner, H. *Microporous Mesoporous Mat.*, **1998**, **20**: 207
- 4 Tsoncheva, T.; Dimitrova, R.; Neinska, Y. *Microporous Mesoporous Mat.*, **1998**, **20**: 217
- 5 Lee, S. H.; Alegaonkar, P. S.; Han, J. H.; Berdinsky, A. S.; Fink, D.; Kwon, Y. U.; Yoo, J. B.; Park, C. Y. *Diamond Relat. Mater.*, **2006**, **15**(10): 1759
- 6 Chen, J. D.; Sheldon, R. A. *J. Catal.*, **1995**, **153**: 1
- 7 Saha, S. K.; Waghmode, S. B.; Maekawa, H.; Komura, K.; Kubota, Y.; Sugi, Y.; Oumi, Y.; Sano, T. *Microporous Mesoporous Mat.*, **2005**, **81**: 289
- 8 Shiju, N. R.; Fiddy, S.; Sonntag, O.; Stockenhuber, M.; Sankar, G. *Chem. Commun.*, **2006**: 4955
- 9 Sun, K.; Fan, F.; Xia, H.; Feng, Z.; Li, W.; Li, C. *J. Phys. Chem. C*, **2008**, **112**: 16036
- 10 Kresse, G.; Hafner, J. *Phys. Rev. B*, **1993**, **48**: 13115
- 11 Kresse, G.; Hafner, J. *Phys. Rev. B*, **1994**, **49**: 14251
- 12 Kresse, G.; Furthmüller, J. *Comput. Mater. Sci.*, **1996**, **6**: 15
- 13 Kresse, G.; Furthmüller, J. *Phys. Rev. B*, **1996**, **54**: 11169
- 14 Perdew, J. P.; Burke, K.; Wang, Y. *Phys. Rev. B*, **1996**, **54**: 16533

- 15 Blöchl, P. E. *Phys. Rev. B*, **1994**, **50**: 17953
- 16 Kresse, G.; Joubert, D. *Phys. Rev. B*, **1999**, **59**: 1758
- 17 Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; *et al.* Gaussian 03, Revision D.01. Wallingford CT: Gaussian, Inc., 2004
- 18 Petersson, G. A.; Al-Laham, M. A. *J. Chem. Phys.*, **1991**, **94**: 6081
- 19 Petersson, G. A.; Bennett, A.; Tensfeldt, T. G.; Al-Laham, M. A.; Shirley, W. A.; Mantzaris, J. *J. Chem. Phys.*, **1988**, **89**: 2193
- 20 Beche, A. D. *Phys. Rev. A*, **1988**, **38**: 3098
- 21 Lee, C.; Yang, W.; Parr, R. G. *Phys. Rev. B*, **1988**, **37**: 785
- 22 Beche, A. D. *J. Chem. Phys.*, **1993**, **98**: 5648
- 23 Long, D. A. The Raman effect: a unified treatment of the theory of Raman scattering by molecules. England: John Wiley & Sons Ltd., 2002: 221–270
- 24 Stair, P. C. *Adv. Catal.*, **2007**, **51**: 75
- 25 Asher, S. A. *Annu. Rev. Phys. Chem.*, **1988**, **39**: 537
- 26 Lian, Y. X. Master Dissertation. Dalian: Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, 2004

## 第十一届全国计算(机)化学学术会议 (第一轮通知)

尊敬的各位专家、学者、教授,

由中国化学会计算机化学专业委员会主办,浙江大学承办的“全国计算机化学会第十一届学术年会”定于2009年10月22–25日在杭州举行.会议组织委员会热忱欢迎国内外从事计算机化学及相关技术研究的专家、学者、教授、青年科研工作者及相关企事业单位积极参与,相互交流学术成果,促进我国计算机化学的发展.

(一) 大会主题: 计算(机)化学发展趋势与战略

(二) 会议内容: 前瞻性综述; 学科现状、前沿及展望; 系统性研究成果; 原创性研究工作; 并邀请仪器厂商展示仪器、软件厂商介绍和演示软件

(三) 会议交流形式: 大会报告、分组邀请和口头报告及墙报展讲、会议代表程序演示

(四) 征文范围

**主题 1 计算化学及其在结构与机理研究等领域的应用**

征文范围: 量子化学理论与方法, 电子、分子结构, 结构与功能关系, 化学反应、催化机理和激发态的理论研究.

**主题 2 计算化学及其在材料与药物分子设计等领域的应用**

征文范围: 分子模拟与分子设计, 多尺度模拟, 定量结构与性能关系研究, 药物设计, 高通量虚拟筛选, 基于数据挖掘方法的基因组、蛋白质相互作用组学研究; 代谢组学及其应用; 计算生物学; 生物信息数据库的构建, 信号传导网络模拟研究等.

**主题 3 化学计量学**

征文范围: 化学计量学新方法与新理论; 指纹图谱分析技术与复杂体系分析; 近红外分析建模与应用; 计算机结构解析与专家系统; 过程分析与过程优化; 高维数据的化学计量学方法研究等.

**主题 4 过程模拟与计算**

征文范围: 过程计算机仿真; 过程模拟与设计、过程优化与控制, 化学信息的计算机处理, 数据挖掘以及 Internet 化学资源的利用; 化学数据库及检索策略等.

(五) 应征论文的受理

本次会议按上述主题接受原创性研究论文和前瞻性综述. 由于各主题的高度交叉, 其主题征文范围仅作为参考. 请各位将论文摘要的电子版直接寄给联系人.

欢迎广大科技工作者踊跃投稿, 积极参加. 欢迎相关仪器厂商企业、高校、科研院所, 利用此次大会良机, 参与会展, 扩大影响. 论文征集截稿日期: 2009年7月30日, 是否录用请见第二、三轮通知. 请关注会议网站([www.sccc2009.org](http://www.sccc2009.org))实时发布的信息.

(六) 应征论文格式要求

论文格式要求: 需提供 A4 版面(上下空 3 cm, 左右空 2.2 cm)的论文详细摘要 1–2 页. 摘要内容应包括: 题目(三号黑体居中)、作者(四号仿宋居中)、作者单位(五号宋体居中, 含城市名称, 邮政编码和 Email 地址并用逗号分开)、关键词(自版芯左起顶格)和主要参考文献(自版芯左起顶格)及英文提要(文题小四号黑体居中, 其它为小五号字, 字体为: Times New Roman). 摘要需按上述顺序撰写, 可以安排主要论据的图、表和照片.(国家自然科学基金项目、省部级以上重大科技项目请在脚注处予以注明, 并在圆括号内注明项目编号.)请按上述要求向会务组提供摘要的电子版.

(七) 会务安排

会议报到时间: 2009年10月22日全天报到; 会议地点: 浙江大学玉泉校区; 会议结束时间: 2009年10月25日

(八) 联系方式

联系人: 王从敏、王勇, E-mail: [chemhwh@zju.edu.cn](mailto:chemhwh@zju.edu.cn); 电话: 0571-87952424; 传真: 0571-87951895

中国化学会计算机化学专业委员会  
第十一届全国计算机化学学术年会组委会