

[Article]

www.whxb.pku.edu.cn

碳纳米管负载纳米 TiO₂ 复合材料的制备及其性能

吴玉程* 刘晓璐 叶敏 解挺 黄新民

(合肥工业大学材料科学与工程学院, 合肥 230009)

摘要: 采用溶胶-凝胶法,以钛酸丁酯为原料,将纳米 TiO₂ 负载在碳纳米管(CNTs)表面,制备了CNT-TiO₂ 光催化复合材料.通过 X 射线衍射(XRD)、透射电子显微镜(TEM)等手段研究了复合颗粒的形态结构及包覆情况,通过 UV-Vis 漫反射谱分析比较了纯 TiO₂ 和 CNT-TiO₂ 的吸光性能,并研究了不同温度热处理的 CNT-TiO₂ 光催化剂在紫外光照射下对甲基橙光催化降解的性能.结果表明,纳米 TiO₂ 颗粒以锐钛矿相存在,紧密地包附在碳纳米管的管壁上,CNT-TiO₂ 在紫外-可见光波长范围内均有较好的吸光性能,450 °C 热处理后的复合光催化剂 CNT-TiO₂ 比纯 TiO₂ 对甲基橙光降解有更高的光催化活性.

关键词: 溶胶-凝胶法; 二氧化钛; 碳纳米管; 光催化

中图分类号: O643.07

Preparation and Properties of Carbon Nanotube-TiO₂ Nanocomposites

WU Yu-Cheng* LIU Xiao-Lu YE Min XIE Ting HUANG Xin-Min

(School of Material Science and Engineering, Hefei University of Technology, Hefei 230009, P. R. China)

Abstract: Coating carbon nanotube surface with TiO₂ as anatase was performed by sol-gel method using Ti(OBu)₄. The morphological structure of the photocatalyst particles was characterized by XRD and TEM. Absorbency was analyzed by the UV-Vis diffuse reflection spectra of TiO₂ and CNT-TiO₂ photocatalysts. The photocatalytic activities of the materials heat-treated at different reaction temperatures have been tested on decomposable substrate methyl orange solution under UV-light illumination. The results showed that the nanocomposites had excellent photocatalytic ability. When the wavelength was between 200–800 nm, CNT-TiO₂ nanocomposites had good absorbency. TEM micrographs showed that TiO₂ was closely coated on the surface of carbon nanotubes. The best heat treatment temperature of CNT-TiO₂ nanocomposites was 450 °C. The crystal form of TiO₂ was anatase and the diameter of crystal was 7.3 nm. The photodegradation rate of CNT-TiO₂ nanocomposites was better than that of pure TiO₂ under sunlight.

Key Words: Sol-gel method; TiO₂; CNTs; Photocatalysis

在众多光催化剂中, TiO₂ 以其活性高、热性能好、持续性长、价格便宜、无毒无害等特性而备受人们青睐. 如何制备既保持高的催化活性又能在不同材料表面均匀牢固负载的催化剂, 是当前光催化研究的重点之一^[1,2].

碳纳米管(CNTs)具有特殊的比表面积和空隙结构, 其表面的键态和电子态与颗粒内部的键态和电子态不同. 碳纳米管表面的原子配位不全, 会导致

表面的活性位置增加, 使其对有机物具有一定的降解性能, 为其作为催化剂提供了基本条件. 以碳纳米管作为TiO₂的载体主要有三个方面优点^[3]: 一是增大反应速率; 二是对决定反应路径具有优良的选择性; 三是降低反应温度. Seeger^[4]和 Hernadi^[5]等将 SiO₂、Al₂O₃ 等无机物负载到碳纳米管上; Jitianu 等^[6]研究了分别以 Ti(OEt)₄、Ti(OPri)₄ 和 TiOSO₄ 为前驱体将 TiO₂ 负载到碳纳米管的制备工艺并进行了比较.

Received: June 18, 2007; Revised: October 16, 2007; Published on Web: November 20, 2007.

*Corresponding author. Email: ycwu@hfut.edu.cn; Tel: +86551-2905085.

国家自然科学基金(20571022)、安徽省十五科技攻关项目(01402007)和教育部博士点基金(20060359011)资助

© Editorial office of Acta Physico-Chimica Sinica

本文采用溶胶-凝胶法制备了 CNT-TiO₂ 复合材料催化剂,以透射电子显微镜、扫描电子显微镜、X 射线衍射、UV-Vis 漫反射谱等技术,对 CNT-TiO₂ 复合材料进行结构表征,并以甲基橙为目标降解物考察了其光催化性能.

1 实验部分

1.1 仪器和试剂

日本理学 D/MAX-rB 型全自动 X 射线衍射分析仪(采用石墨单色器, Cu 靶, 管电压 40 kV, 管电流 80 mA, 扫描速率 1(°)·min⁻¹, 扫描范围 2θ=10°-70°), 日本 JEM-2010(HR)透射电镜(TEM), 722 型可见分光光度计, 日本 DUv-3700 紫外可见分光光度计.

钛酸丁酯(Ti(C₄H₉O)₄), 化学纯, 上海试剂三厂生产; 聚乙二醇(分子量 4000), 广东西陇化工厂生产; 甲基橙(指示剂); 无水乙醇、硝酸、硫酸、硫酸铵、重铬酸钾、氢氧化钠、冰醋酸均为分析纯; 实验用水为蒸馏水.

1.2 碳纳米管的预处理

目前使用不同方法制备的碳纳米管中, 存在着无定形碳颗粒、无定形碳纤维和石墨微粒等杂质, 必须加以提纯^[7].

本文采用液相氧化法制备碳纳米管, 使用硫酸和重铬酸钾的混合溶液对碳纳米管的粗产品进行粗化(表面氧化)处理. 该方法主要是基于碳纳米管两端具有活性, 会从端口首先开始氧化, 而其线长度比碳纳米颗粒和无定形碳的长, 在相同氧化速率下, 碳纳米颗粒和无定形碳等先被氧化去除, 剩下的即为纯净的碳纳米管. 具体处理方法为, 将 CNTs 放入已配制好的纯化液(0.38 mol·L⁻¹ K₂Cr₂O₇+4.5 mol·L⁻¹ H₂SO₄)中, 在 60 °C 水浴和超声波分散条件下反应 6 h 后, 离心过滤, 用蒸馏水反复洗涤至中性, 过滤, 在 100 °C 下烘干. 对纯化后的碳纳米管进行 10 h 球磨处理, 以减小碳纳米管的长径比, 提高其分散性^[8,9].

1.3 CNT-TiO₂ 复合材料的制备

制备所需物质的配比为 $n(\text{Ti}(\text{OBU})_4):n(\text{EtOH}):n(\text{H}_2\text{O}):n(\text{HNO}_3)=1:18:3:0.15$. 准确量取一定量的钛酸丁酯, 溶于无水乙醇中(体积为所需体积的三分之二), 按 $n(\text{Ti}(\text{OBU})_4):n(\text{CH}_3\text{COOH})=1:0.3$ 加入冰醋酸作为抑制剂, 延缓钛酸丁酯的强烈水解, 搅拌 0.5 h 得透明溶液 A.

取预处理后的碳纳米管, 以聚乙二醇作为表面活性剂, 超声分散 1 h 后, 加入到硝酸-蒸馏水-无水

乙醇(无水乙醇的体积为所需体积的三分之一)的混合溶液中, 得到溶液 B.

在强烈搅拌下, 将溶液 A 缓慢滴加到溶液 B 中, 调节溶液 pH 值为 3.0, 室温下反应 2-3 h, 将反应产物离心分离, 用蒸馏水反复清洗, 烘干, 研磨, 再分别在 150、300、450、600 和 750 °C 下焙烧 2 h, 即得 CNT-TiO₂ 复合材料.

将负载后的催化剂准确称量, 放入体积比为 1:1 的硫酸铵和浓硫酸混合溶液中, 加热至沸腾, 定容用 H₂O₂ 显色, 在 λ=410 nm 用分光光度法测定溶液吸光率, 根据 Lambert-Beer 公式计算 TiO₂ 含量^[10].

1.4 光催化实验

光催化反应在自制的光催化反应器中进行. 在反应器中加入 20 mg·L⁻¹ 的甲基橙溶液 250 mL, 加入 750 mg 的催化剂, 用 0.1 mol·L⁻¹ 的硝酸溶液调节体系的 pH 值为 3.0, 静置 0.5 h 使其充分吸附, 并以此时催化剂溶液的浓度作为初始浓度; 将其在 150 W 紫外线灯(主波长为 365 nm)下辐照 3 h(液面与灯的距离为 20 cm), 机械搅拌, 每隔 30 min, 取上层清液, 使用分光光度计测定其吸光度. 低浓度范围内吸光度(A)与催化剂溶液的浓度(C)之间呈很好的线性关系, 遵守 Lambert-Beer 定律. 以脱色率(D)来衡量降解程度(λ=464.6 nm):

$$D=(C_0-C)/C_0 \times 100\%=(A_0-A)/A_0 \times 100\%$$

式中, C₀、C、A₀、A 分别表示初始浓度(催化剂溶液静置 0.5 h 后的溶液浓度)、脱色后的浓度、初始吸光度、脱色后的吸光度.

2 结果与讨论

2.1 TEM 分析

图 1 为预处理(纯化)前后的碳纳米管的 TEM 图. 可以看出, 纯化前碳纳米管表面存在大量堆积的

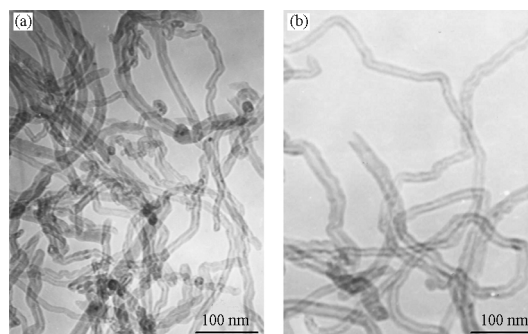


图 1 预处理前(a)后(b)碳纳米管的 TEM 图
Fig.1 TEM morphology of CNTs before (a) and after (b) pretreatment

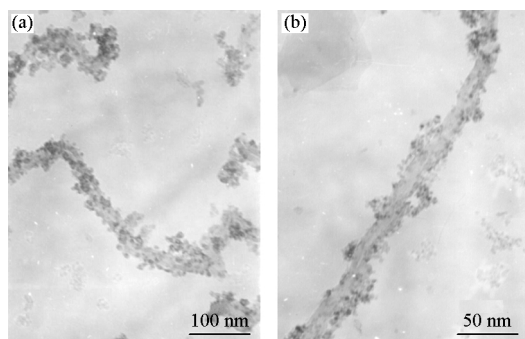


图2 450 °C焙烧 2 h 后 CNT-TiO₂ 复合材料的 TEM 图
Fig.2 TEM morphology of CNT-TiO₂ after heat treatment at 450 °C for 2 h

杂质,如:碳纳米颗粒、无定型碳等,使得碳纳米管相互吸附缠结在一起;经纯化球磨处理后,碳纳米管表面的杂质基本被氧化除去,表面较光洁,粗细均匀,其直径约为 10–20 nm,并且部分碳纳米管的封口被打开,碳纳米管具有较好的分散性。

图 2 为 CNT-TiO₂ 复合材料的 TEM 图。图中管状物为碳纳米管,可以看到碳纳米管光洁的表面包裹了一层纳米 TiO₂ 小颗粒,纳米 TiO₂ 的粒径约为 10 nm,可以由以下 CNT-TiO₂ 复合材料的 XRD 分析得到证实。

从图 2 中可以看到, TiO₂ 颗粒紧密地附在管壁上,而且能够看见碳纳米管的纳米级中空管腔。CNT-TiO₂ 复合材料中碳纳米管的分散性更好,纳米 TiO₂ 呈颗粒团聚态大量聚集吸附在碳管外壁上,包覆均匀致密。碳纳米管具有较高的比表面积,不同层次的孔径结构,其内孔和外壁均具有很好的吸附性能,能够吸附溶液中的氧和有机物,使其在 TiO₂ 表面聚集^[11,12],有助于提高 TiO₂ 对有机物的降解率。

2.2 CNT-TiO₂ 复合材料的结构表征

图 3 为 CNT-TiO₂ 复合材料(a)与碳纳米管(b)的 XRD 谱图。谱线 b 中 2θ 为 25.4° 处是碳纳米管的最强峰,对应(002)衍射峰和(100)能带;引入 TiO₂ 后, CNT-TiO₂ 样品的 XRD 图出现了明显变化(谱线 a),在 2θ 为 25.3° 处与 TiO₂ 锐钛矿主峰相同的位置,出现了二氧化钛的锐钛矿相特征峰,但是碳纳米管的(002)衍射峰由于与 TiO₂(101)峰交迭无法显现。结合复合材料的 TEM 图,表明 TiO₂ 很好地、连续地包覆在碳纳米管表面。

图 4 为不同温度焙烧的 CNT-TiO₂ 复合材料的 XRD 图。可以看出,在 150、300、450 和 600 °C 时,均在 2θ 分别为 25.2°、37.8° 和 47.9° 处出现锐钛矿 TiO₂

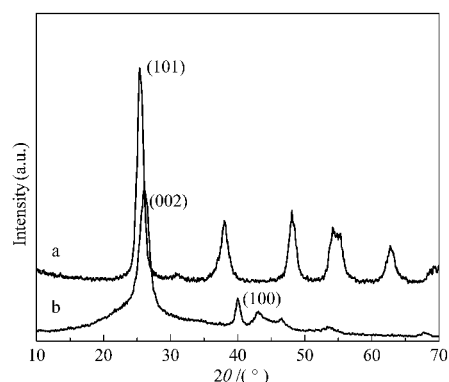


图3 450 °C焙烧 2 h 后 CNT-TiO₂ (a) 和 CNT (b) 的 XRD 谱图

Fig.3 XRD patterns of CNT-TiO₂ (a) and CNTs (b) after heat treatment at 450 °C for 2 h

晶型特征衍射峰(分别对应(101)、(004)和(200)面)。随着温度的升高,锐钛矿相特征峰越来越尖锐,说明晶型越来越规整,晶粒尺寸不断长大。在焙烧温度低于 300 °C 时,样品的 XRD 衍射显示了较宽的 TiO₂ 锐钛矿衍射峰,衍射峰强度较小,结晶程度不高;在 450 °C 焙烧后锐钛矿 TiO₂ 晶型特征峰强度增大,有较好的结晶;600 °C 时在 2θ 为 27.4° 处出现了金红石相 TiO₂ 的特征衍射峰,表明部分 TiO₂ 开始由锐钛矿相转变成金红石相;750 °C 焙烧后, CNT-TiO₂ 复合材料中的纳米 TiO₂ 则主要以金红石相存在。

根据 Scherrer 公式可计算得到, 150、300、450、600 和 750 °C 焙烧后, CNT-TiO₂ 复合催化剂中 TiO₂ 的平均粒径分别为 3.4、5.5、7.3、17.3 和 30.5 nm。

2.3 UV-Vis 漫反射谱分析

图 5 为 450 °C 焙烧后纯 TiO₂、CNTs 及 CNT-TiO₂ 复合材料的紫外-可见光漫反射谱图。可以看出,锐钛矿型 TiO₂ 在 200–400 nm 波长范围内有较强的吸

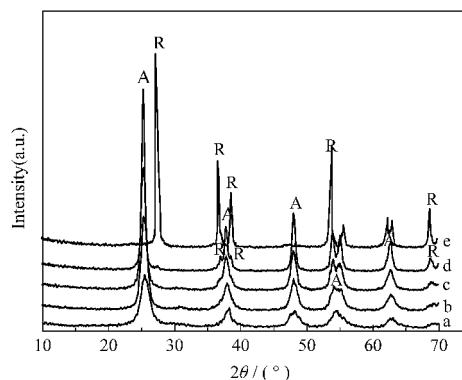


图4 不同温度焙烧时 CNT-TiO₂ 复合材料的 XRD 图
Fig.4 XRD patterns of CNT-TiO₂ at different heat treatment temperatures

A) anatase; R) rutile; T/°C: a) 150; b) 300; c) 450; d) 600; e) 750

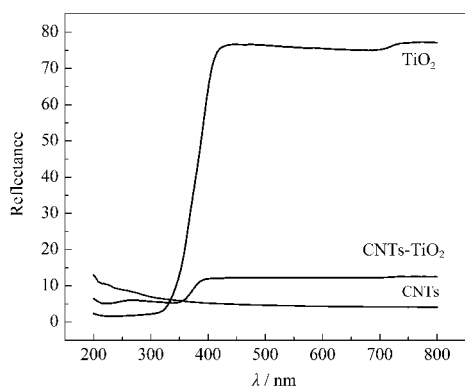


图5 450 °C焙烧2 h后纯TiO₂、CNTs及CNT-TiO₂复合材料的UV-Vis漫反射谱图

Fig.5 UV-Vis diffuse reflection spectra of TiO₂, CNTs, and CNT-TiO₂ photocatalysts after heat treatment at 450 °C for 2 h

光性能;随着波长增大,在400–800 nm波长范围TiO₂对光的吸收强度显著减小.碳纳米管由于其大比表面积、管状结构等特性,具有一定的吸附降解性能及对光有很好的吸收性能,而CNT-TiO₂复合材料由于兼有载体碳纳米管对光的吸收性能和外层TiO₂光催化性,不仅在紫外光区域有较好吸收性能,而且对可见光也有很好的吸收性能,所以对开发日光型催化剂有很大潜力.

2.4 CNT-TiO₂复合材料的光催化性能

将制得的CNT-TiO₂复合材料与纯TiO₂在相同条件下对甲基橙进行光催化降解实验.根据Lambert-Beer公式计算TiO₂的含量,负载的TiO₂含量为87.8%.称取与750 mg CNTs-TiO₂中所含CNTs、TiO₂等量的纯CNTs和纯TiO₂粉末,投加到250 mL浓度为20 mg·L⁻¹的甲基橙水溶液中,静置0.5 h使其充分吸附待降解液.

将450 °C焙烧后CNT-TiO₂复合材料、CNTs以及纯TiO₂在紫外光下照射2.5 h后,测定其对甲基橙的催化分解的降解率,结果见图6. CNTs由于具有很好的吸附性能,对有机物有一定的吸附降解作用. CNT-TiO₂复合材料在甲基橙溶液中很快沉降,采用机械搅拌使其与待降解液充分接触,粉末状纯TiO₂与甲基橙溶液呈浑浊液,分散效果差、光透性不好.从图6中可以看出,复合催化剂和纯CNTs、粉末状纯TiO₂的光催化活性顺序为CNT-TiO₂>TiO₂>CNTs. CNT-TiO₂复合材料的最高降解率为89.7%.

研究表明^[13],待降解溶液分子在TiO₂表面的吸附是其降解的一个重要条件,增大待降解溶液在材料表面的吸附量将有助于溶液分子与TiO₂之间的

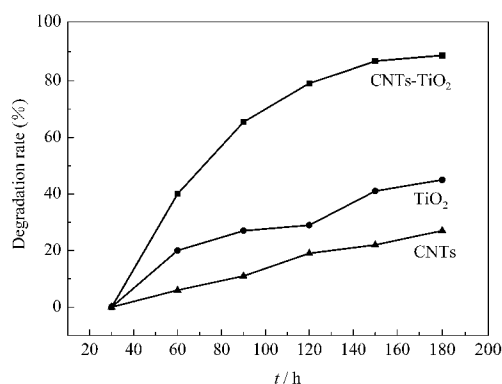


图6 用量为200 mg时CNTs-TiO₂复合材料、CNTs、纯TiO₂的光催化活性

Fig.6 The photodegradation rate of CNT-TiO₂ compositions, CNTs, and pure TiO₂ with an amount of 200 mg

电子转移,从而使待降解溶液的光催化降解率得到提高.经BET测得碳纳米管比表面积为189.3 m²·g⁻¹,450 °C焙烧后的CNT-TiO₂比表面积为283.6 m²·g⁻¹,纯TiO₂粉末的粒径为14.5 nm,比表面积为73.5 m²·g⁻¹.载体碳纳米管特殊的管状结构和大比表面积,使得负载后复合材料比表面积增大,可利用的活性中心增加,复合材料周围的待降解溶液的浓度增大,提高了TiO₂表面氧与有机物的浓度,表面吸附氧在光催化过程中具有俘获光致电子作用,既可抑制光生电子-空穴对的复合,也可作为氧化剂氧化已经羟基化了的反应物,所以光催化活性提高.

另一方面,光催化过程中的关键步骤是抑制电子与空穴的复合,而碳纳米管是电子的良导体,可以有序地导出电子,降低CNT-TiO₂复合材料中的电子积累,降低电子与空穴的复合几率,从而提高复合材料的光催化活性^[14],此方面的观点,还有待更深入的研究和实验验证.

2.5 复合材料光催化性能的影响因素

经不同温度热处理后的复合材料对甲基橙的催化分解的降解率见图7.可以看出,热处理温度为450 °C时,复合材料催化活性最高.

不同的热处理温度影响TiO₂的晶相、粒径及比表面积,而光催化剂的催化活性与这些因素有着密切关系^[15].焙烧可改善纳米粉末的结晶度.300 °C以下TiO₂粒径小但衍射峰强度小,结晶度不高;450 °C焙烧的催化剂有较高的催化活性,是由于此温度能显著地改善锐钛矿相的结晶度,TiO₂以单一的锐钛矿相存在,同时还可能与烧结过程中部分消除了晶面缺陷有关;而温度进一步升高后,晶粒粒径增大,

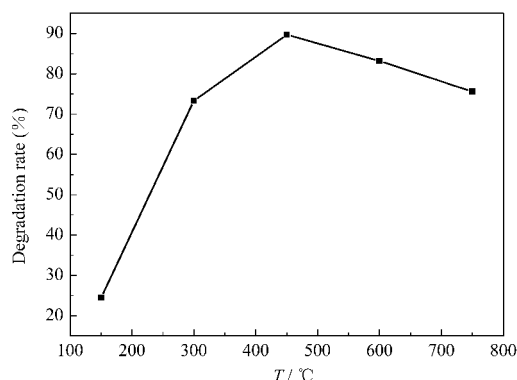


图7 不同温度焙烧时 CNT-TiO₂ 复合材料的降解率
Fig.7 The photodegradation rate of CNT-TiO₂ at different heat treatment temperatures

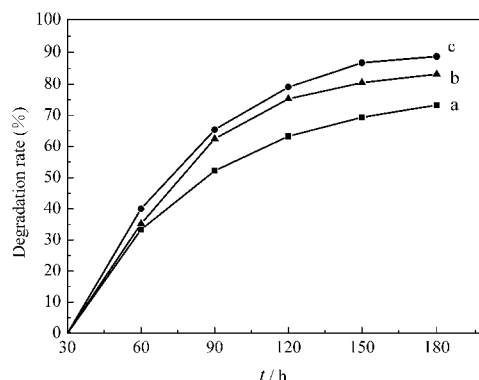


图8 不同晶相的 CNT-TiO₂ 复合材料的降解率
Fig.8 The photodegradation rate of CNT-TiO₂ of different crystal forms
a) rutile (30.5 nm); b) mixed crystal (17.3 nm); c) anatase (7.3 nm)

比表面积急剧下降,能隙红移,氧化还原电势降低,催化活性减弱.所以热处理温度以 450 °C 为宜.

图 8 为 TiO₂ 晶相对复合材料光催化降解效率的影响.复合材料经不同温度焙烧后, TiO₂ 晶相发生变化,由不定型向锐钛矿型再向金红石型转变,600 °C 焙烧后出现了锐钛矿相和金红石相的 TiO₂ 混晶.由于锐钛矿相 TiO₂ 晶格中含有较多的缺陷和位错,从而产生较多的氧空位来捕获电子,使其具有较高的光催化活性;而金红石相 TiO₂ 具有较好的晶态,缺陷少,光生空穴和电子容易复合.锐钛矿相和金红石相的 TiO₂ 混晶的光催化活性介于锐钛矿相和金红石相之间.有些学者^[16]认为,由于混晶效应,锐钛矿相和金红石相的混合物比单一晶型的光催化活性高.陈金媛等^[17]的研究结果则表明,随着混晶中金红石相比例的增加,光催化活性有所降低.随着焙烧温度的升高,粒子表面由于具有较高的表面能,部分锐钛矿相转变成金红石相,在粒子表面形成金红石相薄层,并将内部的锐钛矿相包裹住,由于两种晶型的费米能级不同,界面间能够产生 Schottky 势垒,从而促进光生电子和光生空穴的分离并迁移到催化剂的表面.但随着金红石相薄层厚度的增加,光生电子和光生空穴向表面迁移的路程增大,复合几率也变大,所以光催化活性降低.混晶的粒径比锐钛矿相的大,比表面积小,所以在甲基橙的光催化降解反应中, TiO₂ 晶相为锐钛矿相,晶粒尺寸为 7.3 nm 的 CNT-TiO₂ 复合材料光催化活性最高.

3 结论

(1) 以钛酸丁酯为原料,碳纳米管为载体,采用溶胶-凝胶法制备了 CNT-TiO₂ 复合材料.采用

TEM、XRD 等手段对复合材料进行了结构表征,制备得到的纳米 TiO₂ 均匀分散包覆在 CNTs 表面上,450 °C 热处理后复合材料中的 TiO₂ 晶粒平均粒径约为 7.3 nm. UV-Vis 漫反射谱分析比较了纯 TiO₂、CNTs 和 CNT-TiO₂ 的对光的吸收性能,复合材料在紫外-可见光波长范围内均有较强吸收.

(2) 对不同热处理温度下的 CNT-TiO₂ 复合材料进行了光降解甲基橙实验,结果表明,随着温度的升高, TiO₂ 晶型由锐钛矿相向金红石相转变.450 °C 热处理的复合材料光催化活性比纯 TiO₂ 更高,降解甲基橙 2.5 h,降解率为 89.7%.

(3) 由于载体碳纳米管特殊的管状结构和较大的比表面积,具有很好的吸附性能,使得复合材料周围的待降解溶液的浓度增大,提高了 TiO₂ 表面氧与有机物的浓度,同时碳纳米管本身就具有一定的吸附降解性能,因而, CNT-TiO₂ 兼具了载体和 TiO₂ 二者的优点,具有更高的催化活性,并且复合材料稳定、分散性更好.

References

- 1 Assabane, A.; Yahia, A. I.; Tahire, H.; Guillard, C.; Herrmann, J. *M. Appl. Catal. B*, **2000**, *24*(2): 71
- 2 Cui, P.; Fan, Y. Q.; Xu, N. P. *Chin. J. Catal.*, **2000**, *21*(5): 494 [崔鹏, 范益群, 徐南平. 催化学报, **2000**, *21*(5): 494]
- 3 Liu, J. P.; Sun, H. Q. *Carbon nano-material*. Beijing: Science Press, 2004: 10 [刘吉平, 孙洪强. 碳纳米材料. 北京: 科学出版社, 2004: 10]
- 4 Seeger, T.; Redlich, P.; Grobert, N.; Terrones, M.; Walton, D. R. M.; Kroto, H. W.; Rühle, M. *Chem. Phys. Lett.*, **2001**, *339*(1-2): 41
- 5 Hernadi, K.; Ljubbovi, E.; Seo, J. W.; Forró, L. *Acta Mater.*, **2003**, *51*(5): 1447

- 6 Jitianu, A.; Cacciaguerra, T.; Benoit, R.; Delpeux, S.; Béguin, F.; Bonnamy, S. *Carbon*, **2004**, *42*(5-6): 1147
- 7 Li, F.; Cheng, H. M.; Xing, Y. T.; Tan, P. H.; Su, G. *Carbon*, **2000**, *38*(14): 2041
- 8 Liu, J. Q.; Wu, Y. C.; Xue, R. J.; Hu, X. Y. *Ordnance Material Science and Engineering*, **2005**, *29*(6): 64 [刘家琴, 吴玉程, 薛茹君, 胡小晔. 兵器材料科学与工程, **2005**, *29*(6): 64]
- 9 Hu, X. Y.; Wu, Y. C.; Liu, J. Q. *Electroplating & Finishing*, **2006**, *25*(4): 46 [胡小晔, 吴玉程, 刘家琴. 电镀与涂饰, **2006**, *25*(4): 46]
- 10 Wang, Q.; Yang, D.; Chen, D. M.; Wang, Y. B.; Jiang, Z. Y. *Journal of Nanoparticle Research*, **2007**, *9*(6): 1087
- 11 Wang, K.; Chen, Y. X.; Ye, F. X. *Chin. J. Catal.*, **2004**, *25*(12): 931 [王侃, 陈英旭, 叶芬霞. 催化学报, **2004**, *25*(12): 931]
- 12 Han, F.; Wang, G. Q.; Li, Z. B. *Jiangsu Chemical Industry*, **2001**, *29*(4): 35 [韩峰, 王国庆, 黎载波. 江苏化工, **2001**, *29*(4): 35]
- 13 Liu, S. X.; Liu, H. Basic and application of photocatalytic and photoelectrocatalytic. Beijing: Chemistry Industry Press, 2006: 136 [刘守新, 刘宏. 光催化及光电催化基础与应用. 北京: 化学工业出版社, 2006: 136]
- 14 Zhan, X. Y.; Song, D. D. *Chemical Research and Application*, **2003**, *15*: 471 [詹雪艳, 宋丹丹. 化学研究与应用, **2003**, *15*: 471]
- 15 Wang, Y. M.; Liu, S. W.; Xiu, Z. L.; Jiao, X. B.; Cui, X. P.; Pan, J. *Materials Letters*, **2006**, *60*(7): 974
- 16 Bickley, R. I.; Gonzalez-Carreo, T.; Less, J. S.; Palmisano, L.; Tilley, R. J. D. *Journal of Solid State Chemistry*, **1991**, *92*(1): 178
- 17 Chen, J. Y.; Peng, T. Z. *Acta Chimica Sinica*, **2004**, *62*(20): 2093 [陈金媛, 彭图治. 化学学报, **2004**, *62*(20): 2093]

第十届全国量子化学会议通知

由中国化学会主办、南京大学化学化工学院承办的第十届全国量子化学会议将于2008年5月30日至6月2日在南京举行。本次会议内容涵盖理论与计算化学的各个方面,将有众多的海内外学者和研究生参加。会议将邀请海内外著名专家作大会报告和邀请报告,并安排墙报展讲。受国家自然科学基金委员会化学部的委托,会议期间还将邀请部分专家学者参加“理论化学的发展趋势与前景展望”研讨会。

本次会议将在秀丽的钟山风景区举行,会议组织委员会热忱欢迎从事理论和计算化学研究的同行踊跃参加这次学术盛会。

一. 会议征文范围

(1) 量子化学理论和计算方法; (2) 分子、团簇、固体等的电子结构和谱学计算; (3) 催化反应机理、分子激发态和光化学反应机理的理论研究; (4) 各种材料的结构与性能关系及理论设计; (5) 反应动力学理论和应用; (6) 量子化学和分子模拟在生物、环境和能源等领域的应用; (7) 其它理论与计算化学研究。

二. 征文要求

(1) 符合征文范围、未公开发表的论文均可应征; (2) 页面设置为A4, 论文标题要求尽量简短,用3号(16pt)黑体字居中; (3) 作者姓名用4号(13.75pt)楷体,作者单位用5号(10.5pt)宋体,正文用小4号(12pt)宋体。论文摘要每页约1000字,不宜留出大于1/4页的空白。行距为1.5倍; (4) 插图宽度一般为60mm左右,附表为三线表。图、表中的字符使用6号(8pt)字; (5) 参考文献请按《化学学报》格式著录。“参考文献”四个字用小5号(9pt)黑体、居中,文献用6号字; (6) 论文摘要每页收取版面费100元。

三. 墙报格式

会议将为每位注册代表提供一个墙报展位,尺寸为120cm(高)×90cm(宽)。

四. 会议地点和日程安排

会议地点: 南京国际会议大酒店; 会议时间: 2008年5月30日至6月2日; 会议报到地点: 南京国际会议大酒店

日程安排: 5月30日早上9:00点到晚上10:00点办理报到手续; 5月31日至6月2日学术会议; 6月3日离会。

五. 会议注册

(1) 会议注册网址为 <http://www.10thqc-cn.org>。会议代表必须在网上进行注册,论文摘要的提交也需在网上进行,注册与论文提交的截止日期为2008年2月29日。

(2) 注册费(元) 教师(博士后)/研究生分别为分为1500/1200元,在2008年1月15日前注册将享受优惠价1300/900元。

(3) 请将会议注册费于2008年3月5日前(以邮戳为准)邮寄给会务联系人何煦瑾,并请在汇款单上注明姓名和注册号。

(4) 在注册表中注明希望使用的交流方式(口头报告或墙报)。会议大力提倡墙报交流,只安排少量口头报告,组委会将根据摘要内容及本人意向作出选择,并在网上公布。

(5) 注册表中提供了各种价位的宾馆房型信息,请与会人员尽早预订。

六. 其它 本通知同时在网站 <http://www.10thqc-cn.org> 上发布。自即日起到会议结束,会议有关情况将随时在该网站发布。

七. 联系方式

会议筹备组通讯地址: 南京市汉口路22号南京大学化学化工学院, 邮编: 210093; 电话: 025-83686467; 传真: 025-83686553。

联系人: 何煦瑾. 电子信箱: itcc@nju.edu.cn。