

CN 11-1784/N | ISSN 0023-074X



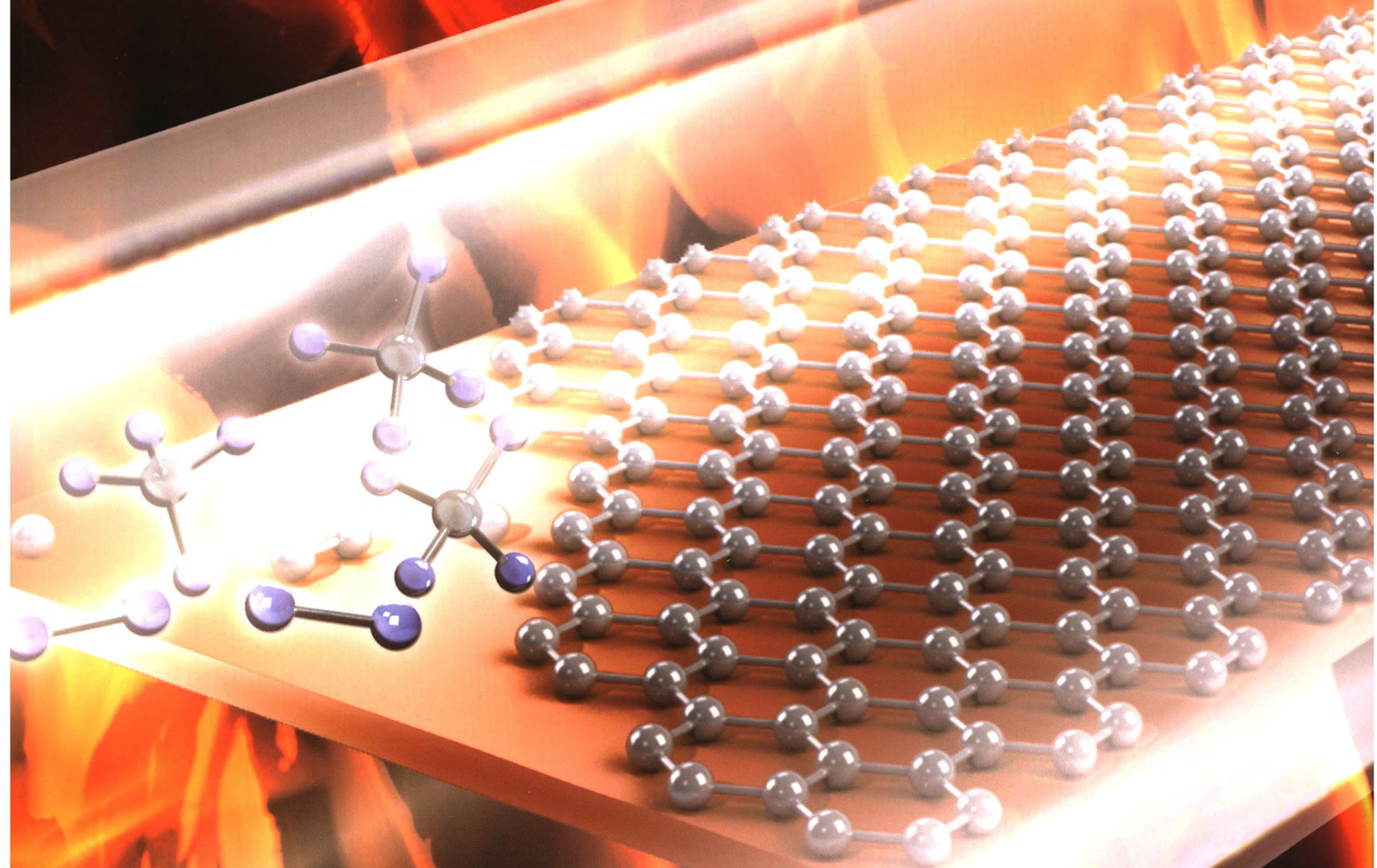
QK1857093

科学通报

Chinese Science Bulletin

2018年11月 第63卷 第33期

专题 理论计算化学



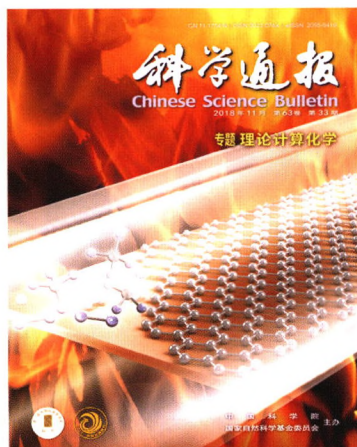
万方数据



中国科学院 主办
国家自然科学基金委员会

科学通报

CHINESE SCIENCE BULLETIN
(KEXUE TONGBAO) (旬刊)



目次

2018年11月, 第63卷, 第33期

封面说明

石墨烯是一种具有广泛应用前景的二维材料. 铜表面化学气相沉积是一种有效的生长制备石墨烯的方法. 通常, 甲烷和氢气被通入到高温炉中, 并在铜表面沉积分解进而生长出大面积的石墨烯. 该过程反应复杂, 同时因为处于高温环境, 实验上很难得到石墨烯生长的微观图像. 为了研究石墨烯生长机理, 李震宇课题组利用第一性原理计算分析了各碳氢物种在铜表面的稳定性并得到了相关基元过程的动力学信息; 基于这些信息, 发展了一些高效算法, 采用动力学蒙特卡洛模拟, 给出了不同生长条件下石墨烯生长的主要动力学路径. 这种结合高精度的第一性原理计算与对复杂过程的直接模拟的多尺度研究方法可普遍应用于其他二维材料生长的研究中. 封面图片简单示意了铜表面化学气相沉积法生长石墨烯所涉及的一些微观过程, 包括表面吸附、表面扩散、表面反应和石墨烯边缘贴附等. 详见李湃等人文(p3419).

亮点述评

- 3391 有机单晶掺杂机制及其电致发光器件应用新突破
谢国华

科技前沿

- 3393 科学家倡议: 设立“世界流感日”

专题: 理论计算化学

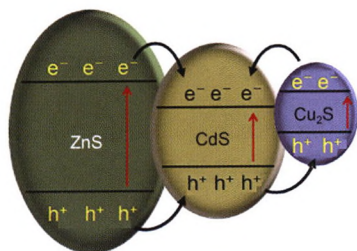
编者按

- 3394 理论计算化学青年人才涌现
帅志刚

进展

- 3396 非键体系中计算红外光谱学的发展与应用: 量子与经典体系
翟羽, 李佳芮, 李辉

从分子动力学的角度回顾了范德华复合物、掺杂量子团簇、掺杂经典团簇与溶液体系等非键体系中理论计算红外光谱学的发展历程, 并展望了该领域未来发展趋势.



▲ 刘研等 p3403

3403 极化电荷设计调控纳米复合体系的能带结构

刘研, 张国桢, 江俊

聚焦新型光催化复合材料的设计和调控, 系统地介绍了复合材料设计中通过体系能带结构的调控实现有效的电荷分离的常用手段, 包括构建肖特基结、p-n结等异质结构和诱导界面电荷极化。

3412 强关联量子杂质体系的精确模拟

郑晓

研究复杂凝聚相体系中的局域量子态, 对量子功能器件的构筑与设计有重要意义。本文简述了本课题组如何从“开放量子体系”的角度出发, 通过发展严格量子耗散理论与精确数值算法, 来研究一系列重要的强关联量子杂质体系。

3419 石墨烯在铜表面生长的多尺度理论研究

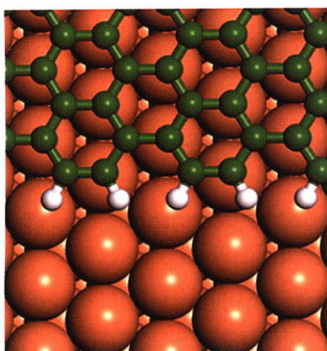
李湃, 李震宇

石墨烯作为一种重要的二维材料, 可通过在铜表面生长来大规模制备。第一性原理计算结合动力学蒙特卡洛模拟, 可以得到不同条件下石墨烯生长的主要动力学路径并揭示铜表面石墨烯的生长机理。

评述**3427 大分子和凝聚相体系的快速量子化学计算: 普适的基于能量的分块方法的发展和应**

廖康, 程正, 李云志, 赵东波, 李伟, 黎书华

介绍了本课题组提出的普适的基于能量分块量子化学方法的发展和应, 包括大体系的基态能量、结构和性质、局域激发态的计算方法及周期性体系的算法。该方法有望应用于多种类型的大体系的能量、结构、振动光谱、核磁化学位移及电子吸收光谱等性质的计算。



▲ 李湃等 p3419

3442 低维自旋电子材料的理论设计与调控

吕海峰, 武晓君

低维度材料的出现极大地促进了自旋电子学的发展。第一性原理计算, 作为研究低维材料的有力工具, 为设计和模拟新型自旋电子学材料, 深入研究其中的物理机制提供了宽广的平台。

3453 过渡金属配合物非绝热动力学模拟的新进展

刘向洋, 崔刚龙

介绍了本课题组发展的基于含时密度泛函理论的广义最少面跳跃方法研究的一系列过渡金属配合物超快的激发态动力学过程的微观机理。该方法为研究过渡金属配合物的激发态动力学提供了强有力的理论工具。

论文**3467 一种基于蛙跳算法的高效分子动力学控温方法的统一方案**

张志军, 严康宇, 刘歆子建, 刘剑

发展了一种基于蛙跳算法的统一理论方案, 能够用于发展方便高效的分子动力学控温算法来模拟实际分子体系的经典(或量子)正则系综。在保持演化稳定性的同时能采用尽量大的时间步长得到精确的构型边缘分布和动量边缘分布。

论文

材料科学

3484 影响锂离子电池实际容量的材料因素

陈宁, 王博, 刘洋, 王丽君, 李阳, 李福桑, 赵海雷

锂离子电池材料实际容量受到广泛关注, 它与理论容量有一定差距. 由于脱锂前后化学键变化复杂, 很难确定差距的本征原因. 本文提出利用脱锂前后能隙比较的方法估算, 并得到了材料基因组大数据统计规律的支持.

水利科学

3494 基于海气耦合模式的南中国海北部风暴潮模拟

伍志元, 蒋昌波, 邓斌, 曹永港

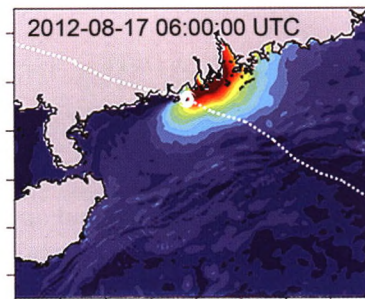
基于大气模式WRF和海洋模式ROMS, 构建南中国海地区海气耦合模式, 针对实际台风进行计算分析, 揭示台风、风暴潮和风生流场的时空分布特征, 为台风-风暴潮动力特征提供科学认识.

建筑科学

3505 包头市室内环境与儿童普通感冒的相关性

毕璐瑶, 金光, 王丽芳, 张寅平, Jan Sundell, 何丽娟

孩子为何频频感冒并一直不见好转是学龄前儿童常见的问题. 这可能与我们每日所处的室内环境有关, 凝结水、发霉等潮湿现象可能都是诱因. 本文探讨了包头市学龄前儿童普通感冒的患病率及其与现代住宅室内环境因素间的相关性.



▲ 伍志元等 p3494

SciEngine 全流程数字出版平台

助力中国科技期刊走向国际



engine.scichina.com

HTML全文展示

兴趣搜索

邮件推送

统计分析定制

学术社交评价

数据库对接

- 国际标准XML制作与排版
- 国际规范出版流程
- 平台交互索引与资源共享
- 一站式运营管理

Volume 63 Number 33 November 2018

Main Contents

- 3396 **Developments and applications of computational infrared spectroscopy in non-bonded systems: Quantal and classical systems**
Yu Zhai, Jia-Rui Li & Hui Li
- 3403 **Energy band engineering of multi-component heteronanostructures by polarization charge design**
Yan Liu, Guozhen Zhang & Jun Jiang
- 3412 **Precise simulation of strongly correlated quantum impurity systems**
Xiao Zheng
- 3419 **Multiscale theoretical studies of graphene growth on copper surfaces**
Pai Li & Zhenyu Li
- 3427 **Fast quantum chemistry calculations for large molecules and condensed-phase systems: The developments and applications of generalized energy-based fragmentation approach**
Kang Liao, Zheng Cheng, Yunzhi Li, Dongbo Zhao, Wei Li & Shuhua Li
- 3442 **Theoretical design and regulation of low-dimensional spintronics**
Haifeng Lü & Xiaojun Wu
- 3453 **Nonadiabatic dynamics simulation method for transition metal complexes: Theory, developments, and applications**
Xiang-Yang Liu & Ganglong Cui
- 3467 **A leap-frog algorithm-based efficient unified thermostat scheme for molecular dynamics**
Zhijun Zhang, Kangyu Yan, Xinzijian Liu & Jian Liu
- 3484 **The material influence factors on the actual capacity of lithium ion battery**
Ning Chen, Bo Wang, Yang Liu, Lijun Wang, Yang Li, Fushen Li & Hailei Zhao
- 3494 **Simulation of the storm surge in the South China Sea based on the coupled sea-air model**
Zhiyuan Wu, Changbo Jiang, Bin Deng & Yonggang Cao
- 3505 **Relationship between indoor environment and children's common cold in Baotou, Inner Mongolia**
Luyao Bi, Guang Jin, Lifang Wang, Yinping Zhang, Jan Sundell & Lijuan He



科学家交流的平台 | 国际科学研究的展台 | 向世界展示的窗口

科学通报

CHINESE SCIENCE BULLETIN

第 63 卷 第 33 期 2018 年 11 月 30 日出版

(版权所有, 未经许可, 不得转载)

主 管	中 国 科 学 院	出 版	《中国科学》杂志社
编 辑	中 国 科 学 院 《科学通报》编辑委员会	印刷装订	艺堂印刷(天津)有限公司
	北京 (100717) 东黄城根北街 16 号	总发行处	北京报刊发行局
主 编	高 福	订购处	全国各邮电局 《中国科学》杂志社发行部

CN11-1784/N ■ ISSN 0023-074X ■ eISSN 2095-9419 国内邮发代号: 80-213



《科学通报》官方
微信订阅号

万方数据

广告发布登记: 京东工商广登字 20170194 号
每期定价: 120.00 元 全年定价: 4320.00 元

ISSN 0023-074X

