国家自然科学基金资助项目

研究成果年报

工程与材料科学

2001

国家自然科学基金委员会

北方交通大学出版社
Northern Jiaotong University Press
北京·BEIJING

需要全本请访问 www.ertongbook.com

内 容 简 介

本书是为了进一步加强对国家自然科学基金资助项目研究成果的管理、宣传与交流而编辑出版的。书中介绍了国家自然科学基金委员会工程与材料科学部资助科学基金项目取得的代表性研究成果共 41 项，其中金属材料学科 2 项，无机非金属材料学科 4 项，有机高分子材料学科 4 项，冶金与矿业学科 5 项，机械学科 7 项，工程热物理与能源利用学科 7 项，电工学科 3 项，建筑环境与结构工程学科 5 项，水利学科 4 项。

书中各项的内容包括：成果名称、主题词、主要研究者及其所在单位、项目批准号、成果简介和代表性论著等，读者可从中了解该成果有关信息，还可做进一步查询。

本书为有关部门了解上述学科近年来的重要进展情况提供了信息，可供从事工程与材料科学基础研究与应用基础研究的专家、学者、研究生、大学本科生和科技管理干部参考。

未经许可，不得以任何方式复制或抄袭本书之部分或全部内容。
版权所有，翻版必究

图书在版编目（CIP）数据

国家自然科学基金资助项目研究成果年报．工程与材料科学．2001/国家自然科学基金委员会主编；金祖亮分册主编．—北京：北方交通大学出版社，2002.3

ISBN 7-81082-035-4

Ⅰ．国…　Ⅱ．①国…②金…　Ⅲ．①中国国家自然科学基金委员会－科研项目－科技成果－2001②工程与材料科学－科技成果－中国－2001　Ⅳ．N12

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2002）第 017009 号

书　　名：国家自然科学基金资助项目研究成果年报·工程与材料科学·2001
主　　编：金祖亮
责任编辑：李　莉
排版制作：北京泰恒祥科技有限公司　　电话：010-62965366
印 刷 者：北京瑞哲印刷厂
装 订 者：北京瑞哲印刷厂
出版发行：北方交通大学出版社　　邮编：100044　　电话：010-62237564　51686045
经　　销：各地新华书店
开　　本：787mm×1092mm　1/16　　印张：3.75　　字数：85.5 千字
版　　次：2002 年 3 月第 1 版　　2002 年 3 月第 1 次印刷
书　　号：ISBN 7-81082-035-4/Z·1
印　　数：1000 册
定　　价：70 元（共七册）

国家自然科学基金资助项目研究成果年报

工程与材料科学

2001 年

编 委 会

主　编　金祖亮

副主编　黎　明

编　委　靳达申　车成卫　高瑞平　董建华

朱旺喜　雷源忠　刘　涛　黄斐梨

茹继平　李万红　张亚南　王之中

目　　录

单轴声悬浮研究.....魏炳波等（1）
过热晶体的熔化机制.....卢　柯等（2）
复合钙钛矿结构材料中有序-无序相变规律及其影响的研究.....张孝文等（3）
新型信息存储材料（自旋转换配合物）的研制和进展.....廖代正等（4）
新型一维富勒烯相关材料的制备与物性研究.....周维亚等（6）
环境净化用新型半导体纳晶光催化材料的研究.....赵进才等（7）
含协效阻燃元素的高效无卤聚合物阻燃剂研究.....王玉忠等（8）
功能高分子复合材料在微观摩擦学领域的应用研究.....史　兵等（9）
不相容聚合物共混中相分散-交联协同作用.....方征平等（10）
混杂聚合膜材料的制备与性能研究.....洪啸吟等（11）
深部软岩巷道围岩大变形的机理及控制.....陆士良等（12）
稀土精矿的分步选择性碳热氯化——化学气相传输反应.....王 之 昌（13）
井眼系统的不稳定性与控制研究.....高德利等（14）
弹性筛面上潮湿细粒粘性物料群的筛分机理.....赵 跃 民（16）
深表土层土体与井壁结构偶合作用机理和参数的研究.....崔广心等（17）
纳米级薄膜润滑理论和实验研究.....温诗铸等（18）
大型结构部件载荷试验方法研究.....阎楚良等（19）
基于 6 维力传感器的灵巧手控制和操作规划.....张 玉 茹（20）
摩擦学设计数据库——[(1)]润滑脂数据库；[(2)]润滑油数据库.....桂长林等（21）
无衍射光理论及其在几何量精密测量中的应用研究.....李　柱等（22）
昆虫运动精密测量方法的研究.....曾理江等（23）
混杂增强铝基复合材料固液径向挤压成形机理的研究.....罗守靖等（24）
对臭氧层无害的新制冷剂 HFC-32 的热物性研究.....朱明善等（25）
叶轮机械弯扭叶片流场结构与控制.....王仲奇等（27）
临界压力区沸腾传热规律的深入研究.....陈听宽等（28）
粒子系辐射换热特性及其反演算法.....刘林华等（29）
热力剪切湍流的大涡数值模拟研究.....庄礼贤等（30）
用分子动力学方法研究超常条件下的导热系数和导热过程.....李志信等（31）
HFC-227ea 及其混合物的物性研究.....史　琳等（32）

大型发电机与变压器的在线监测与故障诊断技术研究.....朱德恒等（34）
聚合物绝缘中空间电荷的形成机理和抑制方法.....屠德民等（35）
三维有限元网格剖分分步实施策略使问题得到明显简化.....袁建生等（37）
桅杆结构非线性动力分析及混沌现象研究.....王肇民等（38）
黄土高原绿色建筑体系与基本聚居单位住区模式研究.....周若祁等（39）
基于实时交通信息的动态交通流诱导系统研究.....杨兆升等（40）
深基坑支护位移和安全性的动态概率预报与控制.....杨林德等（42）
沥青路面的结构行为研究.....孙立军等（43）
喷灌均匀系数设计标准研究取得可喜进展.....李久生等（44）
水力机械空化和多相流三维紊流数值模拟.....吴玉林等（45）
材料强度理论和结构强度理论新体系研究.....俞茂宏等（46）
水-岩土反应的力学与环境效应研究.....汤连生等（48）

需要全本请访问 www.ertongbook.com

单轴声悬浮研究

魏炳波　解文军

（西北工业大学　710072）

主　题　词　声悬浮　单轴模型　悬浮能力　稳定性

项目批准号　59321002　59425002　59481006　59871040

成果简介

在国家自然科学基金项目的持续资助下，西北工业大学魏炳波教授及其合作者在声悬浮研究方面取得重要进展。他们通过提高装置的悬浮力和悬浮稳定性，在国际上首先利用单轴声悬浮技术将金属钨饼悬浮在空中。这一研究成果发表于2001年8月出版的《应用物理快报》上，随后，《自然》杂志于 10 月 4 日对此进行了评述："超声波能够悬浮起像钨那样重的物体。这种无容器的、将物体悬在空中的方法可应用于研究和制备新材料"。据悉，国外目前最大的悬浮能力是把铅球（密度 11.34g/cm^3）悬浮起来，但尚未正式报道，美国航空航天局的研究工作是把钢球（密度 7.8g/cm^3）悬浮起来，而魏炳波等的工作能悬浮起高密度（18.9g/cm^3 ）的金属钨饼，他们的主要研究成果如下。

(1) 成功研制了单轴声悬浮装置。魏炳波教授与其合作者高建荣、曹崇德和解文军研制的"单轴装置"由一个凹球面反射端和一个频率为 16.7kHz 发射器组成，结构简单，应用简便。最近，解文军和魏炳波在《应用物理快报》上发表文章，证明了只要精心设计反射端形状就可以大幅度提高超声悬浮能力。由于成功地提高了单轴声悬浮装置的悬浮力和悬浮稳定性，从而悬浮起高密度（18.9g/cm^3 ）的金属钨饼。该装置已获国家发明专利 2 项。

(2) 建立了详细的理论模型，分析与实验结果非常一致。为了解释优化设计参数与最终实现大悬浮力和高稳定性之间的关系，他们建立了一个详细的理论模型。其理论分析与实验结果非常一致。计算表明当发射端与反射端距离为大约二个波长时，将出现 4 个声场势阱，中间两个为对称轴上的两个点，而靠近发射端和反射端的势阱呈环形，很好地解释了具体的实验现象。

(3) 提供了一种模拟微重力状态的实验方法。在提高声悬浮稳定性和过程可预见性同时，有效地增大了悬浮力。其意义在于为研究和制备新材料提供了一种模拟微重力状态的实验方法，其成本将比空间实验低得多。

主要论著

［1］Xie W J，Wei B．Parametric study of single-axis acoustic levitation．*Appl．Phys．Lett*．，2001，**79** (6): 881－883

［2］Xie W J，Wei B．Space environment simulation for material processing by acoustic

levitation，*Chin．Phys．Lett.*，2001，**18** (1): 68－70

［3］解文军，曹崇德，魏炳波．声悬浮的实验研究和数值模拟分析．物理学报，1999，**48** (2): 250－256

过热晶体的熔化机制

卢　柯　金朝晖

（中国科学院金属研究所　110016）

主　题　词　晶体　熔化　过热　判据

项目批准号　59625101　59771019　59841001　59801011

成果简介

晶体熔化是最常见的自然现象，并且与材料的制备和性能密切相关。通常情况下，过冷液态能够以亚稳态存在而不发生凝固，但实现高于熔点的过热却相当困难。因此过热成为学者们关注的一个基本科学问题。世界各国学者近年来先后提出了多种晶体过热极限理论。

中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家实验室卢柯和金朝晖博士近年来一直致力于这一领域的实验与理论研究，取得了多次创新性成果。最近，他们与德、美两国学者合作，又取得了重要进展。通过计算模拟从原子层次揭示了晶体在极限过热时的熔化过程机制，并从理论角度澄清了现有多种晶格失稳熔化机制之间的内在联系。美国《物理评论快报》（Phys．Rev．Lett.）2001 年 7 月 30 日刊出了他们的研究成果。不久，剑桥大学材料学家罗伯特·坎(Robert．Cahn)对他们的研究成果在《自然》（10 月 11 日）杂志上进行了专题评论，这些成果主要包括：

(1) 长期以来，关于熔化的微观机制（熔化判据）存在分歧，如林德曼（Lindemann）判据、玻恩（Born），此项工作第一次证明，对于无表面的理想晶体，这两种熔化判据及均匀形核灾变判据是统一的。

(2) 计算模拟结果不但证明了多种熔化判据的统一，还揭示出在熔化过程中几种机制的内在联系，从原子尺度上展示了过热晶体熔化的一个完整图像。

(3) 工作揭示了在晶体过热极限温度时原子团的特性与远低于平衡熔点时固体表面的特性相似，这一发现解决了长期以来关于熔化及过热机制中的一个基本问题。

这些研究结果将晶体熔化的林德曼热振幅判据、玻恩刚性失稳机制和动力学均匀形核失稳机制紧密联系起来，提供了过热晶体熔化的完整图像，大大深化了人们对晶格热稳定性的认识，并为进一步理解和利用材料的过热行为提供了理论基础。

主要论著

［1］Jin Z H，Pumbsch K Lu，Ma E．Melting mechanisms at the limit of superheating．

Phys Rev．*Lett*.，2001，**87** (5): 055703－1－4

［2］Zhang L *et al*．Superheating of confined Pb thin films．*Phys*．*Rev*．*Lett*.，2000，**85:** (7): 1484－1487

［3］Jin Z H *et al*．Melting of Pb clusters without free surfaces．*Phys*．*Rev*．*B*，1999，**60**: 141

［4］Lu K *et al*．Homogeneous nucleation catastrophe as a kinetic stability limit for superheated crystal．*Phys*．*Rev*．*Lett*.，1998，**8**: 4474

复合钙钛矿结构材料中有序-无序相变规律及其影响的研究

张孝文　顾秉林　桂　红　方　菲　王　强

(清华大学　100084)

主　题　词　有序–无序相变　弛豫铁电体　钙钛矿结构

项目批准号　59232041　59572036

成果简介

有序–无序相变是多体系统的一般特征，作为凝聚态物理学范式的核心问题之一，有重要的理论意义。在无机非金属材料领域内，以弛豫铁电体铌镁酸铅 $Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O_3$（即 PMN）为代表的，复合钙钛矿结构材料中复合离子的有序化程度，包括有序畴尺度及分布等特征，对材料的性能有重要影响，被认为是区分普通铁电体与弛豫铁电体的一个最重要的结构因素。研究结构有序化的机理，成为理解复合钙钛矿结构材料的一个基本理论问题，被认为是“一个热点也是难点”。

在无机非金属材料领域，复合钙钛矿结构材料的有序–无序相变研究，国内外的大量工作主要集中在实验研究及实验现象的综合唯象分析上。关于 $A(B'B'')O_3$ 有序化规律的研究，在 20 世纪 90 年代以前最有代表性的工作也仅是由 Setter 和 Cross 总结的用离子半径差和电价差等来作判断的五条经验规则。

该项目从 90 年代初以来连续对复合钙钛矿铁电陶瓷中有序–无序转变及其性能关系进行了系统的研究工作，主要成果包括：

(1) 从物理模型及基本理论计算出发进行演绎分析和计算，求得了影响有序化各种因素的一个解析判据式，把过去经验性的规则发展到可以计算的阶段，指出了过去未注意到的材料介电常数对有序化的重要影响。理论不仅能解释很多重要的实验现象，而且很好地预见及纠正了过去一些不正确的实验结果。根据理论与计算，提出的通过控制有序化程度改善材料性能的新工艺，在实际应用中取得了有效成果。

(2) 运用“集团变分法”，系统地研究了 A 位和 B 位各种有序结构中成分、相互作用能参量和温度等因素的影响。从“原子位形几率波”理论，推导出 7 种基态有序结构。

对 PCT 即$(Pb_{0.5}Ca_{0.5})TiO_3$及 PLZT 即$(PbLa)(ZrTi)O_3$进行高分辨电镜观察，从原子点阵图像首次清晰地见到了多种有序结构的共存，验证了理论的预见。

(3) 通过对铌镁酸铅的计算证实了复合钙钛矿型弛豫铁电体中的有序微区是极化微区的结构承担者。建立了弛豫铁电体极性微区转向极化的物理模型，利用 Monte Carlo 方法模拟了实际材料中的介电响应过程，成功地解释了弛豫铁电体在弱场下出现的很多重要的介电特性。

该项目发表的代表性论著，迄今已被他人广泛引用及评价，并应邀多次在国际、国内会议上作特邀报告。有关论文受到国内外同行高度评价，国内同行专家认为“这是把有序-无序结构转变理论的研究向前推进了一大步”、“开启了研究有序化机理的新方法”。国外学者在 1997 年 *J. Mater. Res.* 发表的一文中指出：“到目前为止，和广泛的实验研究相比，张等人的文章是惟一的一篇涉及 B-位离子有序化的理论文章”、“他们的计算公式完满地解释了 $A(B'B'')O_3$型复合钙钛矿结构有序-无序相变的几个重要特性”。

该研究项目获得了 2000 年度教育部高校科技奖基础类一等奖。

主要论著

［1］Zhang Wenxiao，Gui Hong，Liu Zhirong，Gu Binglin．Phase transition of ergodic space shrinking in succession and relaxor ferroelectrics．*Phys．Lett．A*，1999，**251**: 219

［2］Gu Binglin，Gui Hong，Liu Zhirong，Zhang Xiaowen．Possible order-disorder phase diagrams in $(A'_xA''_{1-x})BO_3$ and $A(B'_xB''_{1-x})O_3$ complex perovskites．*J．Appl．Phys．*，1999，**85**: 2408

［3］Gui Hong，Gu Binglin，Zhang Xiaowen．Order-disorder transition in $(A'A'')BO_3$ and $A(B'B'')O_3$ complex perovskite crystals．*J．Am．Ceram．Soc．*，1996，**79**: 381

［4］Fang Fei，Zhang Xiaowen．High resolution transmission electron microscopy study on ordered lead calcium titanate ceramics．*J．Mater．Sci．*，1996，**31**: 1495

［5］Zhang Xiaowen，Wang Qiang，Gu Binglin．Study of the order-disorder transition in $A(B'B'')O_3$ perovskite type ceramics．*J．Am．Ceram．Soc．*，1991，**74**: 2846

新型信息存储材料（自旋转换配合物）的研制和进展

廖代正　李立存　王红梅

（南开大学　300071）

主　题　词　分子材料　自旋转换态　信息存储

项目批准号　59772020

成果简介

实现以单个分子或分子集合体为新的信息存储元件是分子材料研究中的一个挑战性领域，国外称之为“分子电子学”。自旋转换配合物可望是实现信息存储功能的一类理想体系。但能用于实际的此类体系，其自旋转换温度及滞回曲线均应在室温范围内，目前各国学者均沿着这个方向努力。我们项目组在国内率先开展自旋转换配合物的研究，在国家自然科学基金资助下，取得了如下成果：

(1) 合成了 22 种新的配体和 100 多个含自旋载体的磁功能配合物，测定了 28 个单晶结构，研究了配合物基态的自旋态和自旋转换行为与结构间的关系，从而为设计筛选实用型自旋转换配合物提供了指导性信息。

(2) 首次将文献报道的三唑体系延伸到芳香醛缩 4–氨基–1，2，4，三唑（Schiff）碱体系，筛选出 9 种自旋转换温度高于液氮，并具有热致变色现象的自旋转换配合物，其中 8 个伴有滞后现象。特别我们使用“分子合金”新技术（指在原子水平上使两个配合物组装成一个兼有两配合物功能的新物质）得到二个在室温附近具有自旋转换行为并伴有热致变色和滞后现象的自旋转换配合物。

(3) 对于具有使用前景的自旋转换配合物进行了理论研究（文献尚属少见），得到表征配合物自旋转换行为的热力学参数和某些微观参数。诠释了自旋转换伴随滞后的原因。

本项目研究成果在 Inorg．Chem.，J．Chem．Soc．Dalton Trans.，Chem．Lett.，化学学报等国内外刊物上发表论文 41 篇（31 篇被 SCI 收录），获天津市首届自然科学一等奖一项。

主要论著

［1］王红梅，李立存，廖代正等．新型“分子合金”类 Fe(II)配合物的合成和自旋转换性能．化学学报，2000，**59**: 39－2

［2］Shen Haoyu，Liao Daizheng *et al*．New alternating ferro- and antiferromagnetic one-dimensional complexes．Synthesis，characterization，crystal structure and magnetic properties of [M(4，4’-dimethylbipyridine)$(N_3)_2]_n$ [M = Cu(II)，Mn(II)，Ni(II)，Fe(II)] ．*Inorg．Chem.*，2000，**39**: 396－400

［3］Wang Hongmei，Liao Daizheng *et al*．Optical，magnetic and spectroscopic characterization of a novel iron(II) spin-transition compound with a schiff base ligand．*Inorg．Chem．Commun.*，2000，**3**: 198－201

［4］Kou Huizhong，Liao Daizheng *et al*．Magnetic characteristics of two-dimensional bimetallic assemblies，$[Ni(diamine)_2]_2[Fe(CN)_6]NO_3{\cdot}nH_2O$(diamine = 1，3-diaminopropane，*n* =2; eth，ylenediamine，*n* =3)，with a square molecular structure．*J．Chem．Soc．Dalton Trans.*，1998，4161－4164

［5］王红梅，李立存，廖代正等．一种新型的具有滞后现象的自旋转换配合物[Fe(PhCH = Ntrz)$_3$]$(BF_4)_2{\cdot}3H_2O$．高等学校化学学报，1998，**19**: 1020－1022

新型一维富勒烯相关材料的制备与物性研究

周维亚　常保和　潘正伟　孙连峰　唐东升　毛建民　解思深

（中国科学院物理研究所　100080）

主　题　词　一维富勒烯材料　掺杂碳纳米管　物性
项目批准号　59772026

成果简介

对富勒烯家族的两种一维导体 AC_{60}(A=K，Rb)或碳纳米管进行掺杂，以获得全新的一维或二维材料，已成为众所瞩目的重要研究方向。在国家基金委和科学院的支持下，该项目组通过大量实验，发现这种新型一维富勒烯相关材料能揭示出许多独特的物理性质和新的应用价值。已在国内外学术刊物上发表学术论文 18 篇，国际会议论文 5 篇。目前，该项目的部分研究工作已转入 973 国家重点基础研究发展规划项目“纳米材料与纳米结构”子课题——“纳米碳管及其阵列体系的制备、物性和应用”中。主要研究成果如下。

(1) 克服碱金属、碱土金属等掺杂 C_{60} 和碳纳米管在工艺上的困难，探索出制备一维掺杂的 C_{60}、化合物及碳纳米管的优化工艺和条件，得到了很好的碱金属掺杂的 AC_{60} 晶体和掺杂的碳纳米管样品。

(2) 对 AC_{60} 晶体的形貌、结构、电输运、光学和磁学等性质进行了研究。发现 KC_{60} 和 RbC_{60} 具有不同的晶体对称性，这一结果澄清了以前一直认为线性聚合物 KC_{60} 和 RbC_{60} 在结构上无差别的认识，十分有助于人们理解 KC_{60} 和 RbC_{60} 的各种物理性质上的差异。

(3) 研究了线性聚合物 AC_{60} 晶体在常压和高压下从液氦至室温区间的直流和交流电输运性质。用交流测量方法有效地观察到了 RbC_{60} 晶体中部分晶畴之间的弱耦合作用对输运性质的影响。

(4) 研究了外笼型化合物 $C_{60}S_x$ 单晶与一维聚合物 RbC_{60} 单晶的红外吸收和光热偏转谱，证明这两种半导体不仅带隙而且主客体间电子相互作用皆不同。

(5) 改进了碳纳米管的制备工艺，提高了碳纳米管的石墨化程度，并成功地进行了纯化和分离。对用有机气体化学气相裂解沉积法直接生长的定向碳纳米管的结构和形貌进行了研究。制备出离散分布的开口生长的碳纳米管，可直接用于掺杂反应。

(6) 研究了碱金属和卤族元素掺杂的多层碳纳米管的一系列物理性质，如：输运性质、磁学性质、热学和光学性质等，为进一步探索这种新型一维材料的应用价值奠定了基础。

研究结果对一维富勒烯衍生物丰富的结构和奇特的物理、化学性质的理解以及对掺杂碳纳米管特殊结构和物理性质的研究具有重要意义，期望在纳米复合材料以及未来分子电子学器件或纳米电子学器件中得到应用。

需要全本请访问 www.ertongbook.com

主要论著

［1］Zhou W Y，Xie S S，Lu L，Liu E S，Peng Z．Electrical transport property of polymerized KC_{60} and RbC_{60}．*J．Phys．Chem．Solids*，2000，**61**: 1159－1164

［2］Pan Z W，Xie S S，Chang B H *et al*．Direct growth of aligned open carbon nanotubes by chemical vapor deposition．*Chem．Phys．Lett*．，1999，**299**: 97－102

［3］Zhou W Y，Xie S S，Qian S F *et al*．Photothermal deflection spectra of crystalline $C_{60}S_x$ and RbC_{60}．*J．Phys．Chem．Solids*，2000，**61**: 1165－1169

［4］Chang B H，Xie S S，Zhou W Y *et al*．Loosely-entangled carbon nanotubes prepared in modified arc-discharged．*J．Mat．Sci．Lett*．，1998，**17**: 1015－1017

［5］Sun L F，Xie S S，Mao J M *et al*．Effects of temperature oscillations on the growth of carbon nanotubes by chemical vapor deposition．*Appl．Phys．Lett*．，2000，**76**: 828－830

环境净化用新型半导体纳晶光催化材料的研究

赵进才　陈　锋　何建军

（中国科学院化学研究所　100080）

主　题　词　光催化，二氧化钛，放大实验

项目批准号　59772033

成果简介

环境有机污染物光催化降解研究面临着严峻挑战。一方面，在机理认识和技术方面的研究积累日趋完善，并在若干关键难题上取得重大突破；另一方面，由于光源、催化剂带隙匹配、催化剂回收、量子效率等问题，又使这一技术难以进入工业化实施阶段。本项目针对这些问题，取得了如下主要成果：

(1) 易分离高活性光催化剂的研制：将纳米 TiO_2 粒子负载在微米级的多孔载体上，制成了具有很高活性的纳米光催化剂。该催化剂不仅易于分散在水溶液中且很容易分离重复实用。

(2) 流动床光催化放大实验装置的研制：成功研制了一套连续光催化净化染料废水的放大实验装置，对工业染料废水进行了连续降解实验表明，放大装置可使染料废水脱色、COD 大大降低，催化剂能够良好分离并可回收再利用。本项目为光催化技术的应用提供了很好的应用前景。

(3) 可见光照射下染料污染物光催化降解的研究：证明了染料降解是由染料分子被可见光激发，从而与 TiO_2 纳米粒子间发生电子转移生成正碳自由基，注入的电子与吸附氧分子作用生成 O_2^-，进一步氧化染料分子。同时证明染料分子在 TiO_2 表面的吸附是降解的先决条件且酸性条件下的降解速度大于中性或者碱性条件下的降解速度。

(4) 纳米半导体光催化瞬态过程的研究：结果表明反应初期有正碳自由基生成并对

其机理进行了深入的研究。对氧分子在降解过程中的不同活性物种进行俘获并对其作用的进行了突破性的研究。

本项目已在 SCI 收录的国际核心刊物上发表论文 10 篇，在国内核心学术刊物上发表论文 3 篇，申请专利 4 项。

主要论著

［1］He J，Zhao J．Hidaka H，Serpone N．ESR characteristics of dye/colloidal TiO_2 in ethanolic media under visible light irradiation．*J．Chem．Soc．Faraday Trans*，1998，**94**: 2375

［2］Zhang F，Zhao J．Shen T，Hidaka H，Pelizzetti E，Serpone N．Photoassisted degradation of dye pollutants II：Adsorption and degradation kinetics of eosin in TiO_2 dispersions under visible light irradiation．*Appl．Catal．B：Environ．*，1998，**15**: 147

［3］Chen F，Zhao J．Preparation and photocatalytic properties of a novel kind of loaded photocatalyst of $TiO_2/SiO_2/\theta$ -Fe_2O_3．*Catal．Lett*．，1999，**58**: 245

［4］He J，Chen F，Zhao J．Hidaka H．Adsorption model of EF dye on colloidal TiO_2 and the mechanism of the interfacial electron transfer．*Coll．Surf．*，1998，**142**: 49

［5］Liu G，Zhao J．Photocatalytic degradation of dye Sulforhodamine B：A comparative study of photocatalysis with photosensitization．*New J．Chem．*，2000，**24**: 411

含协效阻燃元素的高效无卤聚合物阻燃剂研究

王玉忠　唐旭东　杨科珂　陈晓婷　汪秀丽

（四川大学　610064）

主　题　词　高效阻燃剂　无卤素　阻燃机理

项目批准号　59603007

成果简介

无卤素阻燃剂对高分子材料的阻燃效果比含卤阻燃剂差是其不能广泛应用的主要障碍，课题组通过设计合成在分子结构上同时含有可起协同阻燃作用的阻燃元素的无卤素有机聚合物型阻燃剂，有效地解决了一类无卤阻燃剂的阻燃效率低的问题，取得了如下主要成果：

(1) 在阻燃剂分子中引入了磷和芳环结构，同时引入了与磷可能起协同阻燃作用的元素（如氮、硫等）；在结构方面，主链上含具有更好热稳定性和水解稳定性的 P–C 键；为了确保阻燃剂在应用时具有好的加工性和阻燃耐久性，合成出高分子量的无卤素有机聚合物阻燃剂。

(2) 研究了在主链上同时含有 P 和 N、P 和 S 等阻燃元素的无卤聚合物型阻燃剂的阻燃模式，弄清 P 与 N、P 与不同价态的 S 存在的协同阻燃作用、提出了对不同聚合物

的阻燃机理。

(3) 上述不同阻燃剂对多种高分子材料表现出优异的阻燃性，同时具有无毒、热稳定性高、与聚合物的相容性好、与聚合物成形加工匹配性好、阻燃耐久性突出等特点。

该项成果发表了 10 余篇论文；成果得到了实际应用，获得了 2001 年度国家科技进步二等奖 1 项；国际学术会议上报告 4 次，国内会议大会报告 3 次；应 DuPont KK 研发中心主任邀请，讲学 1 次。

主要论著

［1］王玉忠，郑长义，吴大诚．聚苯膦酸二苯砜酯/PET 阻燃体系的性能研究．高等学校化学学报，1997，**18** (3): 472－476

［2］唐旭东，陈晓婷，王玉忠等．聚苯基膦酸二苯偶氮酯阻燃剂的合成与表征．高等学校化学学报，1998，**19** (11): 1869－1871

［3］唐旭东，陈晓婷，王玉忠等．聚苯基膦酸双酚 A 酯的合成与表征．高分子学报，1998，(3): 372－376

［4］王玉忠，郑长义，杨科珂．聚苯基膦酸二苯砜酯的合成与表征．高分子材料科学与工程，1999，(1): 53－56

［5］Wang Xiuli，Yang Keke，Wang Yuzhong．Physical and Chemical Effect of Diethyl N，N’-Diethanolaminomethylphosphate on Flame Retardancy of Rigid Polyurethane Foam．*J．Appl．Polym．Sci.*，2001，**82** (2): 276－282

功能高分子复合材料在微观摩擦学领域的应用研究

史　兵　雒建斌　路新春

（清华大学 100084）

黄　兰

（北京大学 100871）

主　题　词　功能高分子复合材料　表面修饰　微观摩擦学

项目批准号　59703001

成果简介

该课题研究了利用功能高分子复合材料来实现微观状态下的摩擦控制。首先利用分子设计的方法合理组合官能团，以期望具有该设计结构的高分子复合材料可以达到预计的控制摩擦的目的。所选用的复合材料为表面修饰的 C60 高分子复合材料。运用偶联法及 ATRP 等方法成功的合成了具有所设计的结构及官能团的高分子材料。采用不同的制膜方法在单晶硅及云母基体上制备了单层与多层高分子膜。研究了高分子材料与基体之间界面之间的相互作用。运用原子力显微镜及摩擦力显微镜研究了分子膜的有序状态，多层膜之间的结合力，摩擦学性能，不同端基对分子膜的摩擦学性能的影响，不同复合

材料对摩擦学性能的影响。通过研究测试，经过重新设计分子基团与结构，从而达到控制摩擦的目的。

本项目作为实验室成果的一部分获得 2001 年度国家自然科学二等奖。

主要论著

［1］Shi Bing，Lu Xinchun，Zou Rong，Luo Jianbin，Chen Darong，Huang Lan，Qiu Xiaoyan．Observation of the topography and friction properties of macromolecular thin film at nanometer scale，(*Wear*，in press)

［2］Shi Bing，Lu Xinchun，Luo Jianbin，Chen Darong，Liang Hong，The frictional properties of molecular thin films．*Surface and Interface Analysis*，2001，**32**: 283－285

［3］仇晓琰，黄兰，罗国斌，赵新生，于颖，沈显峰，**史兵**．C60 表面多支化修饰聚合物的制备及其薄膜的初步研究．高等学校化学学报，2001，6

［4］Shi Bing，Lu Xinchun，Luo Jianbin，Huang Lan，Hong Han．Study on synthesis，preparation of LB film and tribological properties of PS-PEO and PEOX．proceedings of 26th Leeds-Lyon Symposium on Tribology．14th－17th，1999，Leeds

不相容聚合物共混中相分散–交联协同作用

方征平　许承威

（浙江大学　310027）

主　题　词　聚合物　共混　相分散–交联协同

项目批准号　59773024

成果简介

增容和交联是改善不相容聚合物共混物性能的两种最常用的方法，而单一方法的改性效果往往有限。课题组在多年工作的基础上，提出了增容–交联协同的思想，通过本课题的研究，发现其核心是相分散–交联的协同，并着重对协同机理进行了探讨，取得了以下主要成果：

(1) 研究了粘度比对聚氯乙烯/聚乙烯(1/1)共混物相形态的影响。通过调节熔融共混过程中的剪切强度控制两组分的粘度比，发现熔体粘度比等于 1 时则接近与双连续相的形态，而且此时交联剂效率最高。这个结果支持了我们提出的相分散–交联协同机理，即相分散剂减小了两相的粘度比，从而促进了两相分散，并使交联剂的效率得以提高。

(2) 在用扫描电镜结合 X–射线能谱分析技术研究聚合物共混物的相形态方面取得一定进展。对不同配比的聚氯乙烯/聚苯乙烯共混物得到清晰的两相分布图象。

(3) 对不相容通用塑料的二元共混体系的相分散–交联协同问题进行了系统的研究，并对影响其力学性能的关键因素进行了探讨，发现共混物的性能主要取决于连续相的性

能，两相间的界面粘结力则居其次。这一结果对聚合物共混改性工作有很好的指导意义。

(4) 将相分散-交联协同技术应用于模拟混杂塑料废弃物取得了良好的改性效果，例如，聚乙烯/聚氯乙烯/聚丙烯/聚苯乙烯（70/10/10/10）体系改性前后，冲击强度由 5kJ/m^2 提高到 32kJ/m^2，拉伸强度由 8.8MPa 提高到 11.2MPa，断裂伸长率由 19%提高到 48%。

发表论文 24 篇，其中在学术刊物上发表 13 篇（其中 7 篇被 SCI/EI 收录），另有 5 篇论文已投稿。论文已被同行引用 8 篇次，有 2 篇论文分别获浙江省优秀论文一、二等奖。此外，“不相容聚合物共混中增容-交联协同作用的研究”获 1999 年国家石化局科技进步二等奖。

主要论著

［1］Influence of viscosity ratio on the morphology of PVC/PE blends．*Eur．Polym．J.*，2000，**36** (10): 2309－2311

［2］Study on phase dispersion-crosslinking synergism in binary blends of polyvinyl chloride with low density polyethylene．*Polymer*，1997，**38** (1): 155－158

［3］Study on the morphology of polyvinyl chloride/polystyrene blends studied by electron microprobe analysis．*Chin．J．Polym．Sci.*，2000，(5): 437－440

［4］ In-situ crosslinking and its synergism with compatibilization in polyvinyl chloride/polyethylene blends．*Polymer*，1997，**38** (1): 131－133

［5］Crosslinking and compatibilization in blends of polystyrene and polyethylene．*Chin．J．Polym．Sci.*，1998，**16** (3): 207－213

混杂聚合膜材料的制备与性能研究

洪啸吟　陈其道　陈　明

(清华大学化学系　100084)

主　题　词　混杂聚合　光固化　膜材料

项目批准号　59773007

成果简介

混杂聚合是聚合物改性的新方法，与共聚和共混不同，它能在原位形成具互穿纲络(IPN)结构的高分子合金，对制备高性能膜材料有重要意义。该项目主要成果与创新点为：

1．混杂光固化体系

研究了自由基-阳离子混杂光聚合体系，发现光引发、固化速度和体积互补等方面有明显的协同效应，固化膜的性能等有显著提高；进行了自由基光固化与厌氧固化制合金膜的研究，克服了光固化受涂膜厚度、颜料和引发剂含量和底形状限制的缺点。

2．自由基-缩聚混杂聚合体系

丙烯酸酯可在引发剂存在下发生自由基聚合反应，HMMM(六甲氧基甲基三聚氰胺)和多元醇在酸的存在下可进行酯交换反应得到聚合物。发现若将丙烯酸酯与 HMMM-多元醇体系混合，不加自由基引发剂便可发生混杂聚合，此新型混杂聚合体系有重要应用前景，因此进行了深入研究。

(1) 发现 HMMM 不仅是缩聚反应的交联剂，也是活泼亚甲氧基氧化生成的过氧化氢物的催化剂。生成的过氧化氢物是原位自由基引发剂。

(2) 酸能催化过氧化氢物的分解，促进自由基聚合反应，潜酸催化剂可以实现低温稳定与高温快干。

(3) 固化过程中自由基聚合放出的热可以有效地传递给缩聚反应。

(4) 由于原位形成了 IPN 结构，固化膜性能显著提高。

研究表明，通过自由基缩聚混杂聚合，可以得到一个低温稳定高温快干、高固体份、高性能、节能的固化体系。在光刻胶、涂料、粘合剂等领域有应用前景。相关研究成果引起了重视，洪啸吟在多次国际会议上做了大会特邀报告。已发表论文 10 余篇，申请专利 2 项，专著 1 本。

主要论著

［1］洪啸吟．光照下的缤纷世界-光敏高分子化学的应用．长沙：湖南教育出版社，1999

［2］Hong Xiaoyin，Chen Qidao，Chen Ming．Synthesis and Characterization of Hyperbranched Poly with Long Fiexible Chains and its Application in Cationic UV Curing．*J．Appl．Polym．Sci．*，2000，**77**: 1353

［3］Chen Qidao Wu Bing，Hong Xiao yin．Effect of Acidity on Acid-Sensitive UV Curing System．*Chin．J．Polym．Sci．*，1999，**17** (1): 43－48

［4］Hong Xiao yin，Chen Qidao，Chen Ming．Stydies on the initiation for free radical –condensation hybrid polymerization．*J．Appl．Polym．Sci．*，2001，79: 1195

［5］孟怀东，阴金香，林天舒，洪啸吟．用于立体光刻技术的阳离子及混杂聚合体系的研究．辐射研究与辐射工艺学报，2000，**18** (1): 19－24

深部软岩巷道围岩大变形的机理及控制

陆士良　漆泰岳　姜耀东　王悦汉

（中国矿业大学　221008）

主　题　词　深井软岩　巷道围岩变形　机理和控制

项目批准号　59574001

需要全本请访问 www.ertongbook.com