研究通讯

短区间中有限非同构 Abel 群的个数

设算术函数 $a(n)$ 表示阶数为 n 的非同构 Abel 群的个数，k 为正整数，以及 $x \geqslant 0$. 命

$$A_k(x) = \sum_{\substack{n \leqslant x \\ a(n)=k}} 1$$

以及

$$A_k(x;h) = A_k(x+h) - A_k(x).$$

关于短区间中 $a(n)$ 值的分布问题首先是由 Ivicé[1] 开始研究的.

Krätzel[2,定理7.8] 把这一问题转化为三维积性问题中余项 $\Delta(1,2,3;x)$ 的估计，进而得到了比 Ivicé[1] 更好的结果.

设

$$\Delta(1,2;x) = \sum_{n \leqslant x} d(1,2;n) - \zeta(2)x - \zeta(1/2)x^{\frac{1}{2}},$$

其中

$$d(1,2;n) = \sum_{m_1 m_2^2 = n} 1.$$

建立在 Krätzel[2,§7.2.2] 的工作基础上，利用简单的三角和估计和初等方法，我们得到了

定理 1 设 $1/6 < v < 1/2$, $\Delta(1,2;x) = O(x^v)$ 以及 $\varepsilon > 0$. 那么对于 k 一致地有

$$A_k(x;h) = \{P_k + o(1)\}h + O(x^{v+\varepsilon}), \quad (1)$$

特别地，对于 k 一致地有

$$A_k(x;h) = (P_k + o(1))h + O(x^{1057/4785+\varepsilon}), \quad (2)$$

这里 $P_k > 0$ 为一常数.

在(2)式中我们用到了 Graham 和 Kolesnik[3] 的估计 $\Delta(1,2;x) = O(x^{1057/4785+\varepsilon})$.

我们的指数 $1057/4785 = 0.2208986\cdots$ 远优于 Krätzel[2] 的指数 11/42.

如果定理 1 中的算术函数 $a(n)$ 换成 $\Omega(n) - \omega(n)$，那么定理 1 仍然成立. 这里 $\Omega(n)$ 表示 n 的全部素因子的个数，$\omega(n)$ 表示 n 的不同素因子的个数.

参 考 文 献

[1] Ivicé, A., *Math. Nachr.*, 1981, **101**: 257—271.

[2] Krätzel, E., *Lattice Point*, D. V. W., Berlin, 1988.

[3] Graham, S. W., Kolesnik, G., *Acta Arith.*, 1987, **49**: 435—447.

曹晓东

（北京石油化工学院基础部数学教研室，北京 102600）

丙烯均相催化聚合的立构温度影响

利用 6，6-环戊烷基富烯与芳基锂作用形成的取代环戊二烯基锂，与双(环戊二烯基)四氯-μ-氧合二钛反应这一新的合成方法，制备了 (η^5-环戊二烯基) [η^5-(1-(4-甲氧基苯基)环已烷基)环戊二烯基]二氯化钛(I). 元素分析、核磁、红外、质谱分析确认合成产物为目标化合物 I. 甲苯/石油醚 (60—90℃) 混合溶液中培养得到 I 的红棕色单晶；在 Nicolet R3M/E 型四圆衍射仪上测定了其晶体结构：$M_r = 437.24$，正交晶条，空间群 $P2_12_12_1$，$a = 9.680(5)$ Å，$b = 12.846(5)$ Å，$c = 16.944(6)$ Å，$V = 2107(1)$ Å^3，$Z = 4$，$D_{calc} =$

1.377g/cm³, $\lambda(MoK_\alpha) = 0.71069$ Å, $F(000) = 912$, $R = 0.066$, $R_w = 0.086$.

对 I/甲基铝氧烷 (MAO) 催化体系,不同温度下合成的聚丙烯，进行质子反转门控去偶 ^{13}C-NMR 定量表征,发现了一些新的丙烯立构聚合结果(见表1). 在低温 (−78℃) 下合成的样品,有 16% 的全同立构聚丙烯是由对映结构活性中心 (enantiomorphic-site) 控制生成 ($\alpha = 0.90$, $\langle m\rangle_{n,\alpha} = 9.1$)[1], 84% 是由链末端结构 (chain-end) 控制生成 ($\sigma = 0.77$, $\langle m\rangle_{n,\sigma} = 4.3$). 在较高温度 (−10℃) 下合成的样品,却生成了完全无规聚丙烯[2], 表明聚丙烯是完全由链末端控制生成的. 在高温 (55℃) 下合成,则生成间同立构聚丙烯，观察值不符合由链末端控制生成间规聚丙烯模型所得的计算值，表明立构控制很可能是由对映结构活性中心 (enantiomorphic-site) 完成的.

表 1　不同聚合温度下产物的 ^{13}C-NMR 五元组值[a)]

聚合温度(℃)	mmmm	mmmr	rmmr	mmrr	mrmm + rmrr	rmrm	rrrr	rrrm	mrrm
	0.39	0.20	0.03	0.06	0.20	0.06	0.01	0.02	0.07
−78	(0.39)	(0.20)	(0.03)	(0.07)	(0.20)	(0.06)	(0.00)	(0.02)	(0.08)
	0.05	0.12	0.07	0.14	0.26	0.11	0.06	0.12	0.08
−10	(0.06)	(0.13)	(0.06)	(0.13)	(0.25)	(0.13)	(0.06)	(0.13)	(0.06)
55	0.00	0.05	0.06	0.08	0.23	0.14	0.17	0.18	0.09

a) 表中括号内为计算值.

以上实验结果表明，我们观察到了在 Ziegler-Natta 催化体系中，同一反应活性中心对丙烯的立构聚合，随着聚合反应温度的变化,可以生成等规、无规、间规三种不同立构取向的聚丙烯.

参 考 文 献

[1] Erker, G., Nolte, R., Aul, R. *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, 1991, 113:7594.

[2] Pino, P., Mülhaupt, R., *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 1980, 19:857.

田　军　胡宁海　沈　琪　黄葆同

(中国科学院长春应用化学研究所,长春 130022)

氢原子在 Ni(115) 台阶面上的吸附和扩散

我们曾引入 5 参数 Morse 势模拟对势，用对势和方法研究了氢原子在镍低指数面上的吸附和扩散，获得较好的结果[1]. 本文用相同的方法和优选参数[1] 进一步考察氢原子在 Ni(115) 台阶面上的吸附和扩散性质.

镍为 FCC 晶体，Ni(115) 台阶面可表示为 Ni(5(100) × (111)) − [01$\bar{1}$], 即由 (100)台面和 (111) 台阶面构成. 我们用462 个镍原子模拟了具有二层台阶的 Ni(115) 台阶面,示意图见图 1(a). 通过计算氢原子在 Ni(115) 台阶面上吸附扩散势能面的临界特性表明，存在三类不等价的氢原子吸附态,分别用 H_1, H_2, 和 H_3 标记. 其中 H_1 和 H_2 是在 (100) 台面上的四重吸附态，H_3 是在 (111) 台阶面上的三重吸附态. 和 H/Ni(100) 体系的四重吸附态H相比较[1]，由于 H_1 态靠台阶最近,吸附几何变形很大,结合能降低最大,为 3.91eV，是最稳定的吸附态，并且出现新的振动模式. 位于台阶面上的三重吸附态 H_3 结合能为 3.00eV，为次稳定吸附态. 与H态相比，H_2 态受台阶影响较小，其临界性质变化较小. 上述理论结果和 Kaufman 等[2]的实验推测结果非常吻合. 图 1(b) 给出氢原子在(100) 台面上沿 [011]