

# 外电场作用下 MgO 分子的特性研究\*

黄多辉<sup>1)†</sup> 王藩侯<sup>1)</sup> 闵 军<sup>1)</sup> 朱正和<sup>3)</sup>

1) 宜宾学院计算物理重点实验室, 宜宾 644007)

2) 宜宾学院物理与电子工程系, 宜宾 644007)

3) 四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

(2008 年 3 月 5 日收到, 2008 年 10 月 22 日收到修改稿)

采用密度泛函理论的 B3LYP 方法在 6-311 + G(2DF) 水平上研究了电场强度为  $-0.03 \sim 0.03$  a. u. 的外电场对 MgO 基态分子的几何结构、HOMO 能级、LUMO 能级、能隙、费米能级、谐振频率和红外光谱强度的影响规律. 结果表明, 在所加的电场范围内, 随着正向电场的增大核间距先减小后增大, 在  $F = 0.02$  a. u. 时,  $R_e$  取得最小为  $0.17397$  nm; 分子总能量不断升高, 但增大的幅度呈减小的趋势;  $E_{H1}$  先增大后减小, 在  $F = 0.01$  a. u. 处取得最大, 其值为  $-0.21765$  a. u.; 而  $E_L$  和  $E_g$  则始终减小. 随着正向电场的逐渐增大, 振动频率逐渐减小. 外电场对 MgO 分子的激发能、振子强度及红外振动光谱的位置和强度均有较大影响.

关键词: MgO, 外电场, 能隙, 红外

PACC: 3120A, 3620K

## 1. 引 言

由于氧化镁是一种重要的化工原料, 在耐火材料、涂料和超导材料等领域有着广泛的应用<sup>[1,2]</sup>. 另外, MgO 的表面碱性使它显著不同于其他酸性、中性或两性载体和吸附剂. 因此它还是一种极具潜力的催化剂、催化剂载体和吸附剂<sup>[3]</sup>. 目前对 MgO 的研究主要集中在晶体合成<sup>[3-7]</sup>、表面结构和催化性能<sup>[8-10]</sup>等方面. 而对 MgO 的外场效应, 即在外加电场或磁场作用下研究 MgO 分子结构及其特性, 还未见报道. 研究分子在外场中的结构是当前最活跃的领域之一<sup>[11-13]</sup>. 分子在外场作用下产生很多能量较高的分子激发态和次级电子, 进而能量较高的激发态和次级电子发生一系列化学变化, 如化学键的断裂、新自由基产生、新激发态生成等<sup>[14,15]</sup>. 因而分子在外场作用下的特性研究是许多领域的重要基础性工作, 具有一定的理论和应用价值. 本文将 MgO 分子置于不同强度的外电场作用下, 采用密度泛函方法计算了 MgO 分子的几何结构、分子能量、分子占

据轨道和空轨道的能级分布、能隙以及 MgO 基态分子在外场作用下的谐振频率(取伸缩振动频率), 并分析了其分子行为. 最后在前面计算的基础上, 采用 TD-B3LYP/6-311 + G(2DF) 方法研究了外电场对由基态到第 1—10 个单重激发态的波长、振子强度和激发能的影响.

## 2. 计算方法

MgO 分子结构为  $C_{\infty v}$  构型, 基电子态为  $X^1 \Sigma^+$ . 采用外加有限电场的方法, 将 MgO 分子置于  $Z$  轴上, 沿  $Z$  轴方向(O-Mg 连线)加一平均电场强度分别为  $1.536, 1.024, 0.512, -0.512, -1.024, -1.536$  GV/m, 即相当于  $0.03, 0.02, 0.01, -0.01, -0.02, -0.03$  a. u. 的电偶极化电场来考察其分子结构及特性. 这些场均是很强的场, 均大于玻璃的击穿电场(玻璃击穿电场为  $0.1$  GV/m). 所有的计算均在 Gaussian 03 软件包进行<sup>[16]</sup>. 在程序中, 分子体系的哈密顿量  $H$  中加入了  $-\mu \cdot F$ ,  $\mu$  为分子的电偶极距矢量,  $F$  为外电场矢量<sup>[17,18]</sup>.

\* 国家自然科学基金(批准号: 10376022), 四川省青年科技基金(批准号: 03ZQ026-061)及四川省青年基金(批准号: 07ZB104)和宜宾学院自然科学基金(批准号: 2008Z10)资助的课题.

† E-mail: hdl912.student@sina.com

### 3. 结果与讨论

#### 3.1. MgO 基态分子的稳定构型

对 MgO 基态分子,分别选用 HF/6-311 +

$\alpha(2DF)$ , LSDA/6-311 + G(2DF), B3P86/6-311 +  $\alpha(2DF)$ , BLYP/6-311 + G(2DF)和 B3LYP/6-311 +  $\alpha(2DF)$ 等方法对其进行了优化计算,优化出的平衡核间距  $R_e$  与能量  $E$  列于表 1 中.从表 1 中可以看出,B3LYP 方法的计算值与实验值最为接近.

表 1 不同方法下 MgO 基态分子的结构参数

	HF	LSDA	B3P86	BLYP	B3LYP	Exp <sup>[20]</sup>
$R_e/\text{nm}$	0.1726	0.1729	0.1737	0.1762	0.1745	0.1749
$E/\text{a.u.}$	-274.3703	-274.1823	-275.6059	-275.2661	-275.2676	

#### 3.2. 不同外电场下 MgO 分子基态结构和外电场对 MgO 分子电荷的影响

以 6-311 +  $\alpha(2DF)$ 为基组,采用 B3LYP 方法,沿 Z 轴(O-Mg 连线)方向加一平均电场强度分别为 -0.03, -0.02, -0.01, 0.01, 0.02 和 0.03 a.u. 的电偶极化电场对 MgO 分子基态结构进行优化计算.

结果表明:不同外场下,MgO 分子基态仍为  $X^1\Sigma^+$ ,优化的几何参数、分子总能量和偶极矩列于表 2 中.外电场作用下分子的稳定构型取决于分子内应力和外场力产生的合力.在强电场下,电子将逆电场发生分范围全局的转移.在得到不同外电场下 MgO 分子基态结构的基础上,分析了电场  $F$  对 MgO 分子电荷分布的影响,结果如表 3 所示.

表 2 优化的 MgO 分子基态键长  $R_e$ 、总能量  $E$  和偶极矩  $\mu$  与外场的关系

$F/\text{a.u.}$	-0.030	-0.02	-0.01	0.01	0.02	0.03
$R_e/\text{nm}$	0.1787	0.1768	0.1754	0.17403	0.17397	0.1744
$E/\text{hartree}^*$	-275.3842	-275.3392	-275.3003	-275.2420	-275.2241	-275.2156
$\mu/10^{29}\text{C}\cdot\text{m}$	-4.7839	-4.1993	-3.5872	-2.1956	-1.3524	-0.2830

\* (1 hartree =  $110.5 \times 10^{-21}\text{J}$ ).

表 3 不同外场下 MgO 分子电荷分布

$F/\text{a.u.}$	-0.030	-0.02	-0.01	0	0.01	0.02	0.03
Mg	0.8890	0.7355	0.5861	0.4425	0.3001	0.1545	0.0210
O	-0.8890	-0.7355	-0.5861	-0.4425	-0.3001	-0.1545	-0.0210

从表 2 中可以看出,几何参数与电场强度的大小有着明显的依赖关系,随着正向电场  $F$  的逐渐增大,核间距  $R_e$  先减小,在  $F = 0.02$  a.u. 时,核间距  $R_e$  取得最小,其值为 0.17397 nm,此后随着电场  $F$  继续增大,核间距  $R_e$  逐渐增大,并且增大的幅度呈上升的趋势,其规律如图 1 所示.图 2 为分子总能量随电场变化的曲线图,从图中可以看出,随着正向电场的逐渐增大,分子总能量逐渐升高,并且增大的幅度呈减小的趋势,表明当电场达到一定程度后,在一定范围内体系能量将达到某一定值.分子偶极矩的大小随电场强度增加而急剧减小,例如  $F = 0.01$  a.u. 时偶极矩的大小为 2.1956,而在  $F = 0.03$  a.u. 时偶极矩的大小为 0.2830,前者是后者的 7 倍多.计算

还表明,在 MgO 分子中,Mg 原子带正电荷,而 O 原子带负电荷,而 MgO 分子本身不带电荷,所以 Mg 原子和 O 原子所带的电荷大小相等,正负相反.随着正向电场的增大,Mg 原子正电性原来越小,相应的 O 原子的电负性也越小,即随着正向电场的增大,Mg 原子和 O 原子周围相应的电荷密度都变小.以 Mg 原子为例,在无电场时,其周围的电荷分布系数是 0.442455,在  $F = 0.03$  a.u. 时,其周围的电荷分布系数变为 0.020964.分子几何参数的变化可以用电荷转移引起分子内电场的变化来定性解释<sup>[17]</sup>,在如图所示的电场范围内(0—0.03 a.u.),随着电场强度的增加,电子由 O 原子向 Mg 原子转移,使得 Mg-O 间的内电场减小,但此时的内应力还是大于外场

力所以  $R_e$  减小,在  $F = 0.02$  a.u. 时,核间距  $R_e$  取得最小值  $0.17397$  nm,此后继续增大电场,大量的电子由 O 原子转向 Mg 原子,使得 Mg 原子和 O 原子的电荷分布系数急剧减小,如在  $F = 0.03$  a.u. 时, Mg 原子周围的电荷分布系数为  $0.020964$ ,O 原子周围的电荷分布系数为  $-0.020964$ ,离子间的库仑力变得非常小,此时起主要作用的是外场力,所以增大电场使得  $R_e$  变大,并且我们预计进一步增大电场,将会使  $R_e$  继续变大,且变大的趋势将进一步增大,这已被我们的计算所证实,在图 1 我们列出了  $F = 0.04$  a.u. 时的  $R_e$ .

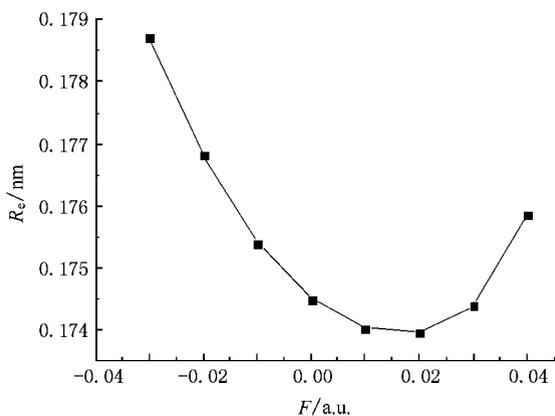


图 1 键长在外场作用下的变化图

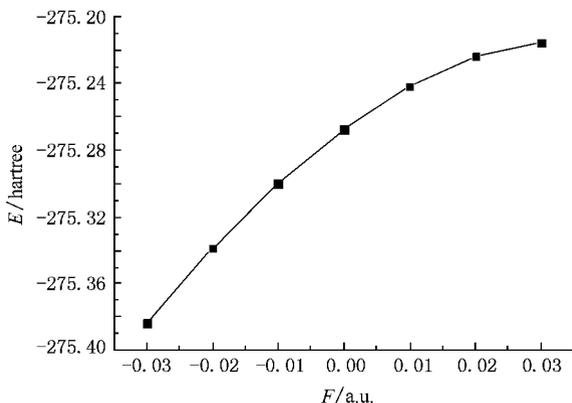


图 2 分子总能量在外场作用下的变化图

### 3.3. 外电场对分子能级的影响

在优化得到不同外电场下 MgO 分子基态稳定结构的基础上,本文还计算了其最高占据轨道(HOMO)能量  $E_H$ ,最低空轨道(LUMO)能量  $E_L$ ,能隙  $E_g$  和费米能级  $E_F$ ,列于表 4 中,其中  $E_g = E_L - E_H$ ,

$E_F = E_H + (E_L - E_H)/2$ . MgO 分子在不同电场下的 HOMO 能级和 LUMO 能级分布如图 3 所示.能隙  $E_g$  随外电场变化的规律见图 4.

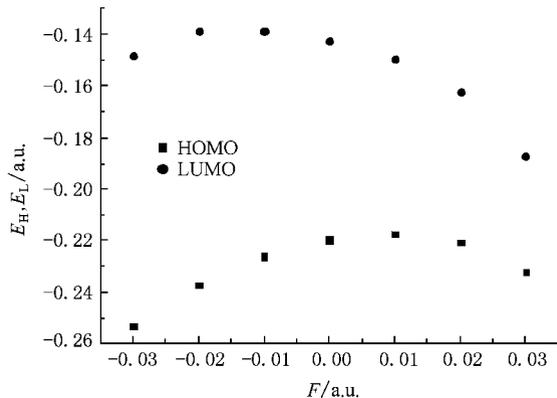


图 3 最高占据轨道能级和最低空轨道能级随外电场的变化图

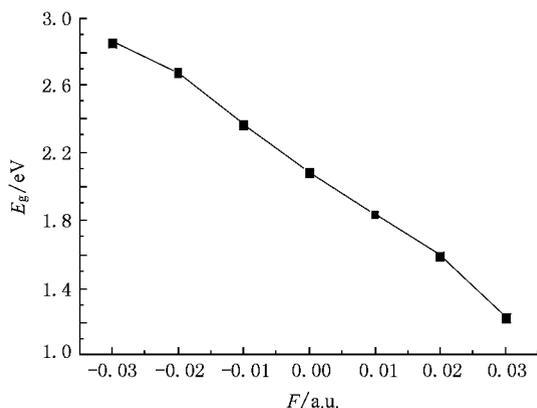


图 4 能隙随外电场的变化图

HOMO 能级反映了分子失去电子能力的强弱, HOMO 能级越高,该分子就越容易失去电子.而 LUMO 能级在数值上与分子的电子亲和势相当, LUMO 能级越低,该分子越易得到电子.而能隙  $E_g$  的大小反映了电子从占据轨道向空轨道发生跃迁的能力,在一定程度上代表了分子参与化学反应的能力<sup>[17,18]</sup>.从表 4 中可以看出:无外电场时,分子的  $E_H$  和  $E_L$  分别为  $-0.2196$  和  $-0.1429$  a.u.,此后随着正向电场的逐渐增大,  $E_H$  先增大后减小,在  $F = 0.01$  a.u. 处取得最大,其值为  $-0.2177$  a.u.;  $E_L$  则始终减小,且减小的幅度呈增大的趋势.而在外电场正向增大的过程中,费米能级  $E_F$  和能隙  $E_g$  始终处于减小趋势,因此占据轨道的电子易于被激发至空轨道,形成空穴,使得 MgO 分子更容易被激发且有可能吸附更多的分子.

表 4 不同外场下 MgO 分子最高占据轨道能量、最低空轨道能量、能隙、谐振频率和红外光谱强度

$F/a.u.$	$E_H/a.u.$	$E_L/a.u.$	$E_g/eV$	$E_F/eV$	$\omega_e/cm^{-1}$	IR Inten/ $cm^{-1}$
-0.030	-0.25322	-0.1483	2.85454	-5.4634	752.8285	78.3454
-0.020	-0.2372	-0.1387	2.6804	-5.1156	787.2958	48.3079
-0.010	-0.2262	-0.1391	2.3688	-4.9699	808.1261	25.4993
0	-0.2196	-0.1429	2.0888	-4.9316	816.8753	10.0668
0.010	-0.2177	-0.1500	1.8401	-5.0027	815.6883	1.6402
0.020	-0.2209	-0.1624	1.5927	-5.2145	800.3940	0.6226
0.030	-0.2324	-0.1872	1.2278	-5.7095	772.1301	11.6383

### 3.4. 外电场对谐振频率和红外光谱的影响

本文还研究了外电场对 MgO 分子振动频率和红外振动光谱的影响,结果如图 5 所示.从图中可以看出,外电场对 MgO 分子的红外振动光谱的位置、强度和振动频率均有较大影响.无外场时,基态分子振动光谱位于  $816.8753\text{ cm}^{-1}$ ,与实验值<sup>[19]</sup> $785.06\text{ cm}^{-1}$ 比较接近;当施加正向电场达到  $0.030\text{ a.u.}$ 时,分子红外光谱位于  $772.1301\text{ cm}^{-1}$ ,光谱的强度为  $11.6383\text{ cm}^{-1}$ ,而施加反向电场为  $-0.030\text{ a.u.}$ 时,分子红外光谱位于  $752.8285\text{ cm}^{-1}$ ,光谱的强度为  $78.3454\text{ cm}^{-1}$ ,且光谱的位置间隔随着正向电场的增大而增大.随着正向电场的逐渐增大,振动频率逐渐减小,且减小的幅度呈增大的趋势.

### 3.5. 外电场对激发能和振子强度的影响

在前面计算的基础上,采用 TD-B3LYP/6-311 +

( $\alpha$  2DF)方法研究了同样外电场下由基态到第 1—10 个单重激发态的波长( $\lambda$ ),振子强度( $f$ )和激发能( $\Delta E$ ),计算结果如表 5 和表 6 所示.

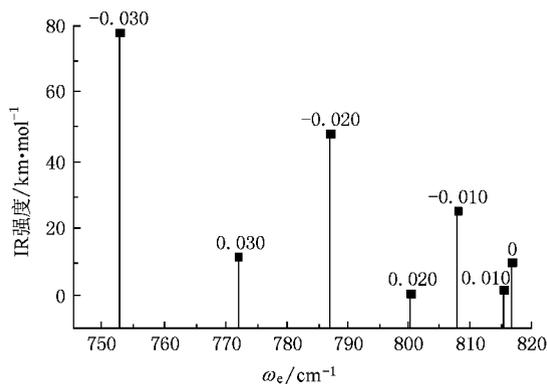


图 5 谐振频率和红外光强度随外电场的变化图

表 5 MgO 分子在不同外场下作用下前 10 个单重激发态的波长( $\lambda$ )和振子强度( $f$ )

$F/a.u.$	0		0.01		0.02		0.03	
	$\lambda/nm$	$f$	$\lambda/nm$	$f$	$\lambda/nm$	$f$	$\lambda/nm$	$f$
$n = 1$	1936.44	0.0019	5682.57	0.0003	3894.82	0.0007	4811.53	0.0012
$n = 2$	1936.44	0.0019	5682.57	0.0003	3894.81	0.0007	4811.53	0.0012
$n = 3$	423.16	0.1225	442.81	0.1338	478.74	0.0000	872.64	0.0001
$n = 4$	301.18	0.0000	316.75	0.0000	478.74	0.0000	872.64	0.0001
$n = 5$	298.72	0.0000	315.71	0.0002	473.00	0.1611	642.62	0.1086
$n = 6$	298.72	0.0000	315.71	0.0002	362.11	0.0005	431.04	0.0787
$n = 7$	244.78	0.0709	314.22	0.0000	326.23	0.0000	324.95	0.0000
$n = 8$	244.78	0.0709	314.21	0.0000	323.83	0.0000	323.02	0.0000
$n = 9$	232.81	0.0544	267.87	0.0720	323.83	0.0000	323.01	0.0000
$n = 10$	232.81	0.0544	251.50	0.1531	257.47	0.1751	263.08	0.0601

表 6 MgO 分子前 10 个单重激发态的激发能( $\Delta E$ )与外场的关系

$F/\text{a.u.}$	$\Delta E/\text{eV}$									
	$n = 1$	2	3	4	5	6	7	8	9	10
-0.030	1.8994	1.8994	2.4941	2.4941	3.1072	13.7517	15.1534	5.1937	5.1937	5.8308
-0.020	1.4605	1.4605	3.2542	3.5757	3.5757	4.4411	4.7410	14.7781	4.7781	5.6920
-0.010	1.0332	1.0332	3.0810	3.0810	4.4294	4.4294	4.6761	4.6761	5.3802	5.3802
0	0.6403	0.6403	2.9299	4.1167	4.1504	14.1504	5.0651	5.0651	5.3255	5.3255
0.010	0.2182	0.2182	2.8000	3.9143	3.9271	3.9271	3.9458	3.9458	4.6286	4.9298
0.020	0.3183	0.3183	2.5898	2.5898	2.6212	3.4240	3.8005	3.8286	3.8287	4.8156
0.030	0.2577	0.2577	1.4208	1.4208	1.9294	2.8764	3.8155	3.8383	3.8384	4.7128

从表 5 和表 6 中的数据可以看出:在无外场情况下由基态到第 4—6 激发态振子强度均为零,属禁阻跃迁.而在不同强度外场作用下激发态的振子强度将发生不同程度的变化.例如基态至第 5 激发态在无外场时振子强度为零,不能激发,而当外电场大于 0.01 a.u.时,振子强度均不为零,基态至第 5 激发态都能产生电子跃迁.如在  $F = 0.01$  a.u.时  $f = 0.0002$ ,  $F = 0.02$  a.u.时  $f = 0.1611$ . 还有些本身是被允许的跃迁,但在加了外电场后就不能跃迁,如:在无外场时,基态至第 7 激发态的振子强度  $f$  为 0.0709,但在  $F = 0.03$  a.u.时,振子强度为零,不能跃迁.电场的引入还改变了 MgO 分子激发态出现的顺序,例如在无外场时,电子状态  $B^1\Sigma^+$  出现在第 3 个激发态,  $F = 0.02$  a.u.时,  $B^1\Sigma^+$  却出现在第 5 个激发态.同时我们从表中还可以看出:1)外电场可以使一些以前是简并的激发态分裂开来;2)绝大多数

态激发能随外电场增大而减小.

## 4. 结 论

本文通过施加外电场研究了 MgO 分子的结构及其特性.分析了外加电场对 MgO 分子键长、分子总能量、能级、谐振频率以及红外光谱强度的影响.由讨论结果可以看出在一定范围内,随着正向电场的增大核间距先减小(在  $F = 0.02$  a.u.时,  $R_e$  取得最小值为 0.17397 nm)后增大;分子总能量不断升高,但增大的幅度呈减小的趋势;  $E_H$  先增大后减小,在  $F = 0.01$  a.u.处取得最大,其值为 -0.2176 a.u,而  $E_L$  和  $E_g$  则始终减小.随着正向电场的逐渐增大,振动频率逐渐减小,且减小的幅度呈增大的趋势.外电场对 MgO 分子的激发能、振子强度及红外振动光谱的位置和强度均有较大影响.

[1] Bhargava A, Alarco J A, Mackinnon I D R 1998 *Mater Lett.* **34** 133  
 [2] Yang P D, Lieber C M 1996 *Science* **273** 1836  
 [3] Guan H B, Wang P, Wang H, Zhao B Y, Zhu Y X, Xie Y C 2006 *Acta Phys. Chim. Sin.* **22** 804 (in Chinese) [管洪波、王培、王晖、赵璧英、朱月香、谢有畅 2006 物理化学学报 **22** 804]  
 [4] Guan H B, Wang P, Zhao B Y, Zhu Y X, Xie Y C 2006 *Chin. J. Catal.* **27** 793 (in Chinese) [管洪波、王培、赵璧英、朱月香、谢有畅 2006 催化学报 **27** 793]  
 [5] Matsumoto T, Kato A 1990 *Ceram Int.* **16** 325  
 [6] Alvarado E, Torres-Martinez L M, Fuentes A F 2000 *Polyhedron.* **19** 2345  
 [7] Mel'gunov M S, Fenelonov V B, Mel'gunova E A 2003 *J. Phys. Chem.* **107** 2427  
 [8] Diwald O, Knéninger E 2002 *J. Phys. Chem. B* **106** 3495  
 [9] Murphy D M, Farley R D, Purnell I J 1999 *J. Phys. Chem. B* **103** 1944

[10] Wang C M, Wang P, Wang H, Zhao B Y, Zhu Y X, Xie Y C 2005 *Chin. J. Catal.* **26** 797 (in Chinese) [王春明、王培、王晖、赵璧英、朱月香、谢有畅 2005 催化学报 **26** 797]  
 [11] Xu G L, Liu Y F, Sun J F, Zhang X Z, Zhu Z H 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5704 (in Chinese) [徐国亮、刘玉芳、孙金锋、张现周、朱正和 2007 物理学报 **56** 5704]  
 [12] Richards R, Li W F, Decker S, Davidson C, Koper O, Zaikovski V, Volodin A, Rieker T, Klabunde K J 2000 *J. Am. Chem. Soc.* **122** 4921  
 [13] Klabunde K J, Stark J, Koper O, Mohs C, Park D G, Decker S, Jiang Y, Lagadic I, Zhang D 1996 *J. Phys. Chem.* **100** 12142  
 [14] Chen X J, Ma M Z, Luo S Z, Zhu Z H 2004 *Atom. Molec. Physics.* **21** 19 (in Chinese) [陈晓军、马美仲、罗顺忠、朱正和 2004 原子与分子物理学报 **21** 19]  
 [15] Xu G L, Xiao X H, Liu Y F, Sun J F, Zhu Z H 2007 *Acta Phys. Chim. Sin.* **23** 746 (in Chinese) [徐国亮、肖小红、刘玉芳、孙金锋、朱正和 2007 物理化学学报 **23** 746]

- [ 16 ] Frisch M J , Trucks G W , Schegel H B 2003 Gaussian 03 , Revision B03. Pittsburgh , PA : Gaussian Inc
- [ 17 ] Ma M Z , Xu G L , Xie A D , Chen X J , Zhang Y B , Zhu Z H 2005 *Chin . J . Chem . Phys .* **18** 64 ( in Chinese ) [ 马美仲、徐国亮、谢安东、陈晓军、张永彬、朱正和 2005 化学物理学报 **18** 64 ]
- [ 18 ] Xie A D , Meng D Q , Luo D L , Ma M Z , Zhu Z H 2007 *Atom . Molec . Physics .* **24** 387 ( in Chinese ) [ 谢安东、蒙大桥、罗德礼、马美仲、朱正和 2007 原子与分子物理学报 **24** 387 ]
- [ 19 ] Xu G L , Xiao X H , Geng Z D , Liu Y F , Zhu Z H 2007 *Acta Phys . Sin .* **56** 5196 ( in Chinese ) [ 徐国亮、肖小红、耿振铎、刘玉芳、朱正和 2007 物理学报 **56** 5196 ]
- [ 20 ] Huber K P , Herzberg G 1979 *Molecular Spectra and Molecular Structure IV Constants of Diatomic Molecules* ( New York Van Nostrand Reinhold Company ) p 402

## Study on structure characteristics of MgO molecule under external electric field<sup>\*</sup>

Huang Duo-Hui<sup>1,2,†</sup> Wang Fan-Hou<sup>1)</sup> Min Jun<sup>1)</sup> Zhu Zheng-He<sup>3)</sup>

1 *Yibin University Key Laboratory of Computational Physics , Yibin University , Yibin 644007 , China*

2 *Department of Physics and Electronic Engineering , Yibin University , Yibin 644007 , China*

3 *Institute of Atomic and Molecular Physics , Sichuan University , Chengdu 610065 , China*

( Received 5 March 2008 ; revised manuscript received 22 October 2008 )

### Abstract

The influence of external electric field ranging from  $-0.03$  to  $0.03$  a. u. on the equilibrium geometry , HOMO energy level , LUMO energy level , energy gap , harmonic frequency and infrared intensity of MgO ground state molecule is investigated by employing the density functional methods ( B3LYP ) with basis sets 6-311 + G ( 2DF ). The results show that the LUMO energy level , energy gap and harmonic frequency decrease , but the total energy increases with increasing external field. The bond length is proved firstly decreasing , then increasing , however , the HOMO energy level is proved firstly increasing , then decreasing with increasing external field. The maximum of HOMO energy level and minimum of bond length are  $-0.21765$  a. u. at  $F = 0.01$  a. u. and  $0.17397$  nm at  $F = 0.02$  a. u , respectively. The external electric field has effect on excitation energies , oscillator strengths and the position and intensity of infrared spectrum.

**Keywords :** MgO , external electric field , energy gap , infrared

**PACC :** 3120A , 3620K

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 10376022 ) , the Youth Science and Technology Foundation of Sichuan Province ( Grant No. 03ZQ026-061 ) , the Youth Foundation of Sichuan Province ( Grant No. 07ZB104 ) , the Natural Science Foundation of Yibin University ( Grant No. 2008Z10 ).

<sup>†</sup> E-mail : hdh912. student @ sina . com