

## Chinese Abstracts (中文摘要)

**光腔衰荡光谱法测量大气中的NO<sub>3</sub>和N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>..... 1**  
 吴昊<sup>a</sup>, 陈剑<sup>b</sup>, 刘安雯<sup>b</sup>, 胡水明<sup>a,b\*</sup>, 张劲松<sup>c</sup> (a. 中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心, 合肥 230026; b. 中国科学技术大学化学与材料科学学院, 合肥 230026; c. 美国加州大学河滨分校化学系和大气污染研究中心, 河滨 92521)

**摘要:** 本文应用于二极管激光器的双路光腔衰荡光谱技术, 分别对大气中NO<sub>3</sub>和N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>浓度进行监测。通过使用实验室标准样校正有效吸收腔长比 $R_L$ 和系统的总损耗系数 $\eta$ , 并获得了NO<sub>3</sub>有效吸收截面。该装置在时间分辨率为1 s时, 对NO<sub>3</sub>的测量灵敏度达到1.1 pptv, N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>被在线转换成NO<sub>3</sub>, 从而被另一路光腔衰荡光谱装置探测。利用该装置, 对合肥市冬季夜间大气中的NO<sub>3</sub>, N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>浓度进行了实时监测。通过对比一次大气快速清除过程中氮氧化物、臭氧、PM<sub>2.5</sub>等组分的浓度变化, 讨论了大气环境下可能影响NO<sub>3</sub>及N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>浓度的因素。

**关键词:** 光腔衰荡光谱, NO<sub>3</sub>自由基, N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, 大气监测

**利用高分辨率光谱和从头算理论研究9-甲基萘的大振幅运动..... 8**  
 Masaaki Baba<sup>a\*</sup>, Ayumi Kanaoka<sup>a</sup>, Akiko Nishiyama<sup>b</sup>, Masatoshi Misono<sup>c</sup>, Takayoshi Ishimoto<sup>d</sup>, Taro Udagawa<sup>e</sup> (a. 日本京都大学理学研究院化学系, 京都 606-8502; b. 波兰哥白尼大学物理、天文和信息学院物理研究所, 托伦 87-100; c. 日本福冈大学理学院应用物理系, 福冈市城南区 814-0180; d. 日本横滨市立大学国际艺术与自然科学研究所协会, 横滨滨泽区 236-0027; e. 日本岐阜大学工程学院化学与生物分子科学系, 岐阜柳堂 501-1193)

**摘要:** 本文利用平行超音速射流和光频梳技术观察到9-甲基萘(9MA)的多普勒的高分辨率和高精度光谱。CH<sub>3</sub>内部旋转的势能曲线用六重对称正弦函数表示。之前报道的9MA-d12的势垒(V<sub>6</sub>)远远低于9MA-h12[M. Baba, *et al.*, *J. Phys. Chem. A* **113**, 2366 (2009)]。本文对多组分分子轨道法进行从头算方法的理论计算。氘取代势垒降低的部分原因是H和D原子核的波函数不同。

**关键词:** CH<sub>3</sub>内部旋转, 9-甲基萘, 高分辨率光谱, 光频梳, 从头算

**HXD中XH拉伸振动的振动跃迁偶极矩方向的理论研究..... 13**  
 Kaito Takahashi\* (中研院原子与分子科学研究所, 台北 10617)

**摘要:** 本文利用局域模研究了“重轻”体系简单分子XH伸缩振动的实验振动光谱。键偶极方法进一步为实验光谱分析提供了帮助(假设XH伸缩振动的跃迁偶极矩沿着XH键方向排列)。通过局域模和多维简正模对HOD, HND<sup>-</sup>, HCD, HSD, HPD<sup>-</sup>和HSiD的XH伸缩振动的理论计算, XH伸缩振动的局部1D图片可以用于分析跃迁偶极矩倾斜角度。在HOD分子中, OH伸缩振动的跃迁偶极矩远离OH键并且向远离OD键的方向倾斜; 在HSD, HND<sup>-</sup>, HPD<sup>-</sup>, HCD和HSiD分子中的XH伸缩振动远离OH键, 但朝向OD键, 表明键偶极近似法不能很好地适用于“重轻体系”分子, 重原子X可以影响跃迁偶极矩方向。利用分子中原子理论分析了偶极矩的变化。

**关键词:** 重轻伸缩振动, 跃迁偶极矩, 振动模式耦合, 定量化学

**基于光梳的腔增强傅里叶变换光谱: 在碰撞线形研究中的应用... 23**  
 Akiko Nishiyama\*, Grzegorz Kowzan, Dominik Charczun, Ryszard S. Trawiński, Piotr Masłowski\* (波兰哥白尼大学物理、天文和信息学院物理研究所, 托伦 87-100)

**摘要:** 本文在近红外区域构造了基于光学频率梳的腔增强傅里叶变换光谱仪, 并用于Ar干扰的CO振转跃迁的谱线研究, 高灵敏度的测量波数从6270 cm<sup>-1</sup>到6410 cm<sup>-1</sup>, 涵盖CO第二泛频带的P和R分支。该光谱仪提供的高分辨率超过了由于干涉图长度确定的傅立叶变换分辨率极限, 成功消除了线型函数的振铃和展宽效应。本文可观察到Voigt线型曲线外的碰撞效应。通过拟合速度依赖的Voigt曲线重新得到碰撞线型曲线参数, 并与使用基于光学频率梳的高精密连续激光光腔衰荡光谱测量结果非常吻合。

**关键词:** 一氧化碳, 光学频率梳, 光谱线型, 腔增强吸收光谱, 傅里叶变换光谱

**甲胺水合离子团簇的结构模型及红外光谱研究..... 31**

蒋述康<sup>a,b,c,d</sup>, 杨冬<sup>b,d</sup>, 孔祥涛<sup>b</sup>, 王冲<sup>b,d</sup>, 臧翔宇<sup>b,d</sup>, 郑会俊<sup>b,d</sup>, 李刚<sup>b</sup>, 谢华<sup>b</sup>, 张未卿<sup>b</sup>, 杨学明<sup>a,b,c</sup>, 江凌<sup>b\*</sup> (a. 中国科学院上海高等研究院, 上海 201210; b. 中国科学院大连化学物理研究所, 分子反应动力学国家重点实验室, 大连 116023; c. 上海科技大学物质科学与技术学院, 上海 201210; d. 中国科学院大学, 北京 100049)

**摘要:** 本文利用量子化学计算方法, 研究了甲胺和水复合离子团簇[(CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>)(H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>]<sup>+</sup>的几何结构、能量和红外光谱, 揭示了结构生长模型、氢键作用机制和质子转移机理。研究结果表明, 在[(CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>)(H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>]<sup>+</sup>团簇中, 甲胺甲基上的一个氢原子转移到氨基上, 形成分子内质子转移的CH<sub>2</sub>NH<sub>3</sub><sup>+</sup>离子核心结构模型, 水分子作为氢键受体, 与质子化氨基NH<sub>3</sub><sup>+</sup>形成氢键。CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub><sup>+</sup>离子核心结构模型没有CH<sub>2</sub>NH<sub>3</sub><sup>+</sup>离子核心结构模型稳定。在团簇的红外光谱中, CH振动、自由NH振动、氢键结合的NH振动和OH振动模式在CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub><sup>+</sup>和CH<sub>2</sub>NH<sub>3</sub><sup>+</sup>两种离子核心结构模型的理论计算红外光谱中明显不同, 因此可用于鉴别甲胺水合离子团簇的结构模型, 有助于理解甲胺和水复合团簇的氢键网络结构。

**关键词:** 甲胺, 水, 结构, 能学, 红外光谱

**5.33 μm处磁旋转吸收光谱NO分子探测研究..... 37**

方波<sup>a,b</sup>, 杨娜娜<sup>a,b</sup>, 王春晖<sup>a,c</sup>, 赵卫雄<sup>a\*</sup>, 徐学哲<sup>a</sup>, 张杨<sup>a</sup>, 张为俊<sup>a,c\*</sup> (a. 中国科学院安徽光学精密机械研究所, 大气物理化学研究室, 合肥 230031; b. 中国科学技术大学, 科学岛分院, 合肥 230026; c. 中国科学技术大学环境科学与光电技术学院, 合肥 230026)

**摘要:** 本文基于直流磁场的磁旋转吸收光谱技术探测研究一氧化氮分子的痕量。使用5.33 μm连续波量子级联激光器作为探测光源, 结合Chernin型光学多通池, 在1875.81 cm<sup>-1</sup>(<sup>2</sup>Π<sub>3/2</sub>(3/2), ν=1←0)波长处进行探测。108 m吸收光程下, 实现了1.15 ppbv的探测极限(1s, 1σ)。当采样时间延长到15 s, 探测极限可提高至0.43 ppbv。

**关键词:** 磁旋转吸收光谱, 中红外, 激光光谱, 一氧化氮

**超声分子束中中性态和离子态吡咯烷的红外光谱..... 43**

谢敏\*, 张兆李, 张宇, 孙晓楠, 孙福飞, 胡勇军\* (华南师范大学光子学院激光生命科学研究室, 广州光谱分析与功能探针重点实验室, 激光生命科学教育部重点实验室, 广州 510631)

**摘要:** 本文应用真空紫外光电离结合红外光解离以及飞行时间质谱技术获得超声分子束中吡咯烷单体在中性态和离子态的红外光谱。研究发现, 吡咯烷在中性态和离子态的CH伸缩振动均有不同程度的红移现象。在中性态吡咯烷中, 由于NH的电偶极矩较小, 没有观察到NH伸缩振动峰。而电离后的吡咯烷NH伸缩振动峰有很大的增强, 并与其他实验相比出现红移现象。通过理论计算发现中性态和离子态的CH伸缩振动的红移分别是由反超共轭和正超共轭现象引起的。而NH峰的增强和红移则是由于N原子上的电子被电离所引起的。通过计算分子的气态酸碱度发现, 在离子态中, CH的酸性比NH的酸性略强。

**关键词:** 红外光谱, 超共轭现象, 离子态, CH键的酸性, 气态

**2,3,6-三氟吡啶的转动光谱: 氟化对吡啶环结构的影响..... 48**

陈军华, 汪娟, 冯刚, 勾茜\* (重庆大学化学化工学院, 重庆 401331)  
**摘要:** 本文利用脉冲喷射傅立叶变换微波波数在2~20 GHz的频率范围研究了2,3,6-三氟吡啶基态的转动光谱。实验转动常数A=3134.4479(2) MHz、B=1346.79372(7) MHz、C=941.99495(6) MHz。转动跃迁的信号很强使得可以在自然丰度下测定所有单个碳-13和氮-15取代的同位素异构体的转动跃迁。通过考虑非简谐振动校正, 推导出七个同位素异构体的半实验平衡转动常数, 利用该半实验平衡转动常数测定了2,3,6-三氟吡啶的准确平衡结构。

**关键词:** 2,3,6-三氟吡啶, 氟化, 半实验结构, 转动光谱

**2-三氟甲基吡啶的转动光谱及分子结构研究..... 53**

汪娟, 李小龙, 勾茜, 冯刚\* (重庆大学化学化工学院, 重庆 401331)  
**摘要:** 本文测定了2-三氟甲基吡啶在2~20 GHz频率范围内的高分辨转动光谱。测定了转动常数、<sup>14</sup>N核四极耦合常数及离心畸变常数等一系列光谱参数。同时还在自然丰度下测定了5个<sup>13</sup>C和1个<sup>14</sup>N单取代同位素异构体的光谱数据。实验结果结合从头算准确地推导出2-三氟甲基吡啶的骨架结构。实验测得同位素异构体的平面转动惯量P<sub>cc</sub>数值均为44.46 uÅ<sup>2</sup>, 表明此分子具有C<sub>s</sub>对称性。此外, 本文计算了吡啶、2-氟吡啶、2-甲基吡啶和2-三氟甲基吡啶的分子表面静电势, 以此分析了三氟甲基的取代对电子分布的影响。

**关键词:** 转动光谱, 氟化效应, 分子结构, 超声射流, 从头算

**铂基团簇Pt<sub>3</sub>X(X=Al, Si, Cu)催化水制氢及其水解副产物氧化CO..... 58**

谢文丽, 孙振东\* (山东大学物理学院, 济南 250100; 喀什大学物理与电气工程学院, 喀什 844006)

**摘要:** 本文基于第一性原理研究了利用具有幻数结构特点的Pt<sub>3</sub>X(X=Al, Si, Cu)团簇仅通过一步反应就能催化分解水制氢的反应过程。吸附物H<sub>2</sub>O@Pt<sub>3</sub>X团簇在波长300~760 nm的紫外和可见光范围内有强吸收,表明太阳光可以方便地用于Pt<sub>3</sub>X的催化水解制氢的反应。此外,水解后滞留在团簇上的O原子可在反应活化能为0.34~0.58 eV内与CO氧化反应生成CO<sub>2</sub>。这个通过氧化消除“毒性”CO的结果表明了反应副产物有能作催化剂的循环再利用能力。本文发现生成的CO<sub>2</sub>分子还可以在323 K的温度下脱离Pt<sub>3</sub>X小团簇。

**关键词:** 水解,制氢,消除CO,铂基团簇,光催化剂

**氙代最简单Criegee中间体CD<sub>2</sub>OO的振转光谱研究** ..... 65  
李军\* (重庆大学化学化工学院, 重庆 401331)

**摘要:** 本文采用振动自洽场/虚组态相关(VSCF/VCI)方法计算了氙代最简单Criegee中间体CD<sub>2</sub>OO的振动和转动光谱。计算得到的基频振动频率和转动常数与已有实验吻合。这些数据可以用于未来该体系的光谱研究,特别是振动激发的转动常数对于实验光谱指认非常重要。另外,不同来源的光谱强度,包括本文理论计算,文献中在NEVPT2和B3LYP水平上的计算结果以及实验结果,互相之间均不符合。

**关键词:** Criegee中间体, 振动光谱, 转动常数, 多模式计算, 势能面

**胆绿素二甲酯金属锌配合物超快激发态动力学研究** ..... 69

陈壮<sup>a</sup>, 刘阳依<sup>a</sup>, 和晓晓<sup>a\*</sup>, 陈缙泉<sup>a,b\*</sup> (a. 华东师范大学精密光谱科学与技术国家重点实验室, 上海 200241; b. 山西大学极端光学协同创新中心, 太原 030006)

**摘要:** 胆绿素(BV)及其二甲酯(BVE)是一种生物内源性色素,他们在溶液中具有极弱的荧光,量子产率小于0.01%。然而,随着锌离子的加入,情况发生了变化。BVE-Zn<sup>2+</sup>配合物的荧光强度大大增强,荧光QY可提高到~5%。本文研究了BVE-Zn<sup>2+</sup>络合物在乙醇、正丙醇和二甲亚砜溶液中的超快激发态动力学,以揭示其荧光增强的机理。结果表明,BVE能与锌离子在溶液中形成1:1的稳定配合物,BVE分子结构在复合物中较为刚性,能量上更稳定。利用皮秒时间分辨荧光光谱和飞秒瞬态吸收光谱技术,发现BVE-Zn<sup>2+</sup>配合物在二甲亚砜中具有较小的非辐射速率常数,这是其高荧光量子产率关键原因。

**关键词:** 胆绿素, 锌离子, 荧光, 量子产率, 飞秒瞬态吸收, 激发态动力学

**AgO分子C<sup>2</sup>Π-X<sup>2</sup>Π(0, 0)带高分辨光谱再研究** ..... 75

张强<sup>a,b</sup>, 张德萍<sup>a</sup>, 朱波星<sup>a</sup>, 顾景旺<sup>a</sup>, 赵东锋<sup>a\*</sup>, 陈旸<sup>a\*</sup> (a. 中国科学技术大学化学物理系, 合肥微尺度物质科学国家研究中心, 合肥 230026; b. 瑞士保罗谢勒研究所, 菲利根 CH-5232)

**摘要:** 本文利用激光诱导荧光技术对AgO分子C<sup>2</sup>Π-X<sup>2</sup>Π(0, 0)带光谱在~0.02 cm<sup>-1</sup>分辨率水平开展了高分辨研究。在超声射流条件下利用银针电极对O<sub>2</sub>/Ar混合气高压放电制备AgO分子,利用自行研制的窄线宽单纵模光参量振荡器作为可调谐激光光源,实验记录了同位素分辨的<sup>107</sup>Ag<sup>16</sup>O和<sup>109</sup>Ag<sup>16</sup>O分子C<sup>2</sup>Π-X<sup>2</sup>Π(0, 0)带的高分辨光谱。通过对实验光谱的转动分析获得了两个同位素分子的精确光谱常数,其中<sup>107</sup>Ag<sup>16</sup>O分子C<sup>2</sup>Π态常数为首次实验测定。结合文献和理论计算,实验观测的C<sup>2</sup>Π态自旋-轨道耦合效应很可能来自于与四重解离态<sup>4</sup>Σ<sup>-</sup>或<sup>4</sup>Π的态混合。

**关键词:** AgO分子, 高分辨光谱, 激光诱导荧光

**尘埃表面化学理论模拟研究进展** ..... 79

陈龙飞<sup>a,b\*</sup>, 李芳芳<sup>a</sup>, 常强<sup>c</sup> (a. 中国科学院新疆天文台, 乌鲁木齐 830011; b. 中国科学院大学天文与空间科学学院, 北京 100049; c. 山东理工大学物理与光电工程学院, 淄博 255000)

**摘要:** 近年来天体化学在解释星际分子的形成过程中起重要作用的尘埃表面化学取得了长足的发展,本文综述了在天体化学模拟中用到的各种数值计算方法,以及尘埃冰幔的化学模型。同时也介绍在实验室天体化学方面获得的结果,及其对尘埃表面化学所起到的促进作用。

**关键词:** 天体化学, 星际分子, 表面化学, 实验室天体化学

**对原行星盘中易挥发物质缺失问题的简要综述** ..... 85

杜福君\* (中国科学院紫金山天文台, 南京 210033)

**摘要:** 年轻恒星周围存在盘状的气体和尘埃分布,称为原行星盘,行星在其中形成。为了认识恒星和行星的形成和演化以及构成行星的原材料,对这些盘的观测是必须的。数值模型有助于从观测数据提取出重要的物理参数,包括盘的尘埃和气体的质量。这些参数可以作为进一步模拟的输入参数,预期热化学模拟能复现各种分子的观测数据。但是,对于许多原行星盘,模型算出的多种分子的发射强度高于观测值。真实的盘中这些分子的丰度比理论预期低,这是易挥发物质的缺

失问题。本文指出在这个问题上理论与观测的差异意味着尘埃的演化对气体化学有重要影响,提示在这些盘中行星形成的早期阶段已经开始了。

**关键词:** 天体化学, 星周物质, 分子光谱, 行星系统, 行星与盘的相互作用, 行星形成

**用两束真空紫外激光和离子速度成像方法测量<sup>12</sup>C<sup>16</sup>O分子在108000~113200 cm<sup>-1</sup>能量范围的解离通道分支比:生成O(<sup>1</sup>D)通道的观测** ..... 91

高燕<sup>a,b\*</sup>, 宋煜<sup>b</sup>, William M. Jackson<sup>b</sup>, 伍灼耀<sup>b</sup> (a. 中国科学院化学研究所, 北京分子科学国家研究中心, 北京 100190; b. 加利福尼亚大学戴维斯分校化学系, 戴维斯 95616)

**摘要:** 本文利用两束可调谐真空紫外激光和离子速度成像的方法测量了CO在108000~113200 cm<sup>-1</sup>光解离通道分支比[C(<sup>3</sup>P<sub>0</sub>+O(<sup>1</sup>D))]/{[C(<sup>3</sup>P<sub>0</sub>+O(<sup>3</sup>P))]+[C(<sup>3</sup>P<sub>0</sub>+O(<sup>1</sup>D))]}和[C(<sup>3</sup>P<sub>2</sub>+O(<sup>1</sup>D))]/{[C(<sup>3</sup>P<sub>2</sub>+O(<sup>3</sup>P))]+[C(<sup>3</sup>P<sub>2</sub>+O(<sup>1</sup>D))]}。本文先用一束真空紫外激光将CO分子激发至特定的高激发量子态并发生解离,接着用另一束真空紫外激光选择性地电离C(<sup>3</sup>P<sub>0</sub>)和C(<sup>3</sup>P<sub>2</sub>)并进行探测。1VUV+1UV/visible共振增强多光子电离的方法大大提高了实验的探测灵敏度,使得之前没有观测到的较弱的吸收带也首次被观测到。通过分支比的测量,发现自旋禁阻的解离通道C(<sup>3</sup>P<sub>0</sub>+O(<sup>1</sup>D))和C(<sup>3</sup>P<sub>2</sub>+O(<sup>1</sup>D))只在某些分立的较窄能量范围内才能被观测到。这可能是由于直接激发的高里德堡态和解离到上述自旋禁阻通道的价态在这些能量范围内发生了共振的自旋-轨道耦合相互作用。

**关键词:** 一氧化碳, 真空紫外, 光解离, 通道分支比, 离子速度成像

**氢化富勒烯能否解释天文光谱中的21 μm辐射特征?** ..... 101

张冰\* (中山大学物理与天文学院, 珠海 519082; 香港大学太空研究实验室, 香港)

**摘要:** 目前在天文环境中探测到了C<sub>60</sub>、C<sub>70</sub>、C<sub>60</sub><sup>+</sup>,极大地刺激了对星周包层中富勒烯衍生物的研究。原行星状星云是富勒烯在天文环境下的可能形成源,其红外光谱中具有丰富的、还未能认证的特征谱带,其中在21 μm处的一条谱带尤为神秘。当富勒烯被氢化,分子的对称性被破坏,能够激活新的红外振动谱,这有可能部分解释天文光谱中的红外谱带。本文对氢化富勒烯的理论振动谱进行研究,考查了氢化富勒烯能否作为21 μm辐射的载体,详细讨论了各种支持和反对的证据,并且推测了可能贡献21 μm特征的氢化富勒烯的氢化程度。

**关键词:** 氢化富勒烯, 红外, 渐近巨星支和后渐近巨星支, 星周物质, 恒星

**星际氧分子的气相-尘埃模型研究** ..... 107

张霞<sup>a,b</sup>, 全冬晖<sup>a,c\*</sup>, 加尔肯·叶生别克<sup>a,d</sup> (a. 中国科学院新疆天文台, 乌鲁木齐 830011; b. 中国科学院大学, 北京 100049; c. 美国东肯塔基大学化学系, 里士满 KY 40475; d. 中国科学院射电重点实验室, 乌鲁木齐 830011)

**摘要:** 本文采用气相-尘埃模型Nautilus研究了星际氧气的演化过程,使用了两种典型初始丰度值下的恒温模型和变化物理条件下的加热模型进行模拟计算。结果表明,在冷致密云条件下,CO、O<sub>2</sub>和H<sub>2</sub>O达到峰值的时间依赖于氢核密度的多少,其随氢核密度的增大而减小。在加热模型中,在温度升高后的10<sup>5</sup>年后,氧气的丰度值与观测结果符合较好。在温度大于30 K后,氧气的稳态丰度值将不再随氢核密度而变化,且大于此温度可以阻止氧气大量的沉降到尘埃表面。此外,无论在恒温模型还是在加热模型中,低氢核密度更有利于O<sub>2</sub>的生成。

**关键词:** 天体化学, 模型, 星际介质, 分子, 丰度

**光深对大质量恒星形成团块化学性质研究的影响** ..... 114

周建军<sup>a,c</sup>, 李润霞<sup>a,b\*</sup>, 全冬晖<sup>a,d</sup>, 加尔肯·叶生别克<sup>a,c</sup>, 何玉新<sup>a,c</sup>, 李大磊<sup>a,c</sup>, 汤新弟<sup>a,c</sup>, 吴刚<sup>a,c</sup>, 纪伟光<sup>a,c</sup>, 常正雪<sup>a,b</sup>, 张霞<sup>a,b</sup> (a. 中国科学院新疆天文台, 乌鲁木齐 830011; b. 中国科学院大学, 北京 100049; c. 中国科学院射电重点实验室, 乌鲁木齐 830011; d. 美国东肯塔基大学化学系, 里士满 KY 40475)

**摘要:** 本文使用文献中的N<sub>2</sub>H<sup>+</sup>(1-0)、H<sup>13</sup>CO<sup>+</sup>(1-0)、HCN(1-0)和HN<sup>13</sup>C(1-0)谱线数据研究大质量恒星形成团块的化学性质和演化,发现H<sup>13</sup>CO<sup>+</sup>和HN<sup>13</sup>C的丰度受H<sub>2</sub>柱密度的影响。由于从A阶段到B阶段这两个丰度的中值增加了近10倍,H<sup>13</sup>CO<sup>+</sup>和HN<sup>13</sup>C适合追踪大质量恒星形成团块的演化。从A到B阶段四种分子丰度增长速度从低到高依次为H<sup>13</sup>CO<sup>+</sup>、HCN、HN<sup>13</sup>C、N<sub>2</sub>H<sup>+</sup>。结果表明进行光学薄分子谱线的高分辨率观测对于研究大质量恒星形成团块的化学演化是必要的。

**关键词:** 恒星形成, 团块, 分子射电谱线

**乙基苯胺的转动光谱及分子结构** ..... 119

汪娟<sup>a,b</sup>, Sven Herbers<sup>b</sup>, Philipp Buschmann<sup>b</sup>, Kevin Lengsfeld<sup>b</sup>, Jens-Uwe Grabow<sup>b\*</sup>, 冯刚<sup>a</sup>, 勾茜<sup>a\*</sup> (a. 重庆大学化学化工学院, 重庆 401331; b. 德国汉诺威莱布尼兹大学物理化学与电化研究所, 汉诺威 30167)

**摘要:** 本文使用傅里叶变换微波谱仪研究了乙基苯胺类物质(邻乙基苯胺, 间乙基苯胺, 对乙基苯胺)的分子结构. 由于此类分子含氮原子( $I^{14}\text{N}=1$ ), 因此跃迁谱线中都呈现出核四级裂分. 通过比较实验测定得到的分子结构, 可总结苯胺环上不同位置乙基的取代对氨基及分子整体结构的影响.

**关键词:** 转动光谱, 分子结构, 超声喷射, 核四级耦合效应

**2~6 GHz范围内二苯并呋喃的纯旋转光谱** ..... 125

周海花<sup>a</sup>, 刘增魁<sup>a</sup>, 陈子秋<sup>a\*</sup>, 孙铭<sup>b\*</sup>, 陈钱<sup>b\*</sup>, 段圣文<sup>b</sup>, 焦超<sup>b</sup> (a. 兰州大学化学工程学院, 兰州 730000; b. 南京理工大学电子工程与光电技术学院, 南京 210094)

**摘要:** 本文使用自己搭建的宽带啁啾脉冲傅里叶变换微波谱仪对二苯并呋喃在2~6 GHz范围内的转动光谱的测量和归属. 对微波光谱的分析获得了40个b型跃迁的归属, 精确地确定了旋转常数 $A=2278.19770(38)$  MHz、 $B=601.12248(10)$  MHz和 $C=475.753120(98)$  MHz.

**关键词:** 二苯并呋喃, 多环芳烃, 宽带转动光谱