

Chinese Abstracts (中文摘要)

二维傅里叶变换光谱实验方法简介 385
周梁, 田烈, 张文凯* (北京师范大学物理学系, 应用光学北京市重点实验室, 高等量子研究中心, 北京 100875)

摘要: 二维傅里叶变换光谱是近几十年来发展起来的一种先进光谱技术. 与其他超快光谱方法相比, 它具有许多优点, 并且为研究各种复杂系统提供了巨大的机会. 然而, 二维傅里叶变换光谱的系统搭建、实验测量和理论描述仍面临许多挑战, 从而限制了其广泛应用. 近年来, 随着超快激光等各种相关技术的发展和革新, 二维傅里叶变换光谱方法也逐渐发展成熟, 进而大大降低了进行二维傅里叶变换光谱实验的技术壁垒. 对于二维傅里叶变换光谱实验装置的光学设计, 目前存在许多不同的方法, 每种方法都有其自身的优点和局限性. 但是目前还没有一个简单的教程可以帮助实验工作者选择搭建其第一套二维傅里叶变换光谱实验装置. 因此, 本文旨在为计划搭建其第一套二维傅里叶变换光谱实验装置的初学者提供一个简短的介绍.

关键词: 二维傅里叶变换光谱, 二维红外光谱, 二维电子光谱

金属有机框架材料UiO-66-NH₂中的铜离子掺杂位置效应及相关动力学研究 394
刘佳, 江申龙, 张群* (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, 量子信息与量子科技协同创新中心, 合肥 230026)

摘要: 本文通过调控合成构建了两种类型的铜离子掺杂金属有机框架(MOF)材料UiO-66-NH₂: 一种是Cu²⁺离子浸渍在MOF孔隙中所形成的Cu@UiO-66-NH₂, 另一种则是Cu²⁺离子部分取代Zr-O团簇中的Zr⁴⁺离子所形成的双金属中心Cu-UiO-66-NH₂. 超快光谱与动力学表征表明: 与未掺杂的MOF相比, 这两个铜离子掺杂的MOF体系均促进了与LCCT态相关的弛豫动力学, 其促进程度的顺序为Cu-UiO-66-NH₂>Cu@UiO-66-NH₂>UiO-66-NH₂; 这与它们在可见光催化析氢活性测试中所观察到的趋势一致. 该工作揭示了Zr基MOF体系中的铜离子掺杂位置效应及相关动力学, 表明可在类似MOF体系中通过合理设计金属掺杂的具体位置来促进光致电荷分离、抑制有害的电荷复合, 有利于提高MOF体系的光催化性能.

关键词: 金属有机骨架材料, 铜掺杂, 位置效应, 超快动力学, 瞬态吸收光谱, 光催化

对氯氟苯S₀、S₁和D₀态的实验与理论研究 401
凡佳因, 崔婷婷, 秦正波*, 郑贤锋*, 崔执凤 (安徽师范大学物理系, 光电材料科学与技术安徽省重点实验室, 芜湖 241000)

摘要: 本文采用共振增强多光子电离和慢电子速度成像技术研究了对氯氟苯(p-ClFPh)在中性第一激发态和阳离子基态下的几何结构和振动频率. 给出了对氯氟苯S₀态的红外光谱和S₁←S₀跃迁的吸收光谱. 基于单色、双色共振增强双光子电离技术, 得到了对氯氟苯的跃迁激发能是36302±4 cm⁻¹. 通过阈值电离测量, 外推得到对氯氟苯的绝热电离能为72937±8 cm⁻¹. 此外, 通过Franck-Condon模拟, 确定了S₁和D₀态的主要振动模式, 并分析了对氯氟苯分子S₀&S₁和S₁&D₀跃迁过程中的Duschinsky振动模式混合效应.

关键词: 共振增强多光子电离, 慢电子速度成像, Duschinsky振动模式混合效应, 对氯氟苯

用浓度调制光谱法测量水汽辉光放电中OH和H₂O的布居数变化 411
李宝^a, 王莉^a, 方波^b, 赵卫雄^b, 邓伦华^{a*}, 徐淮良^{a,c} (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 200062; b. 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; c. 吉林大学电子科学与工程学院, 集成光电子学国家重点实验室, 长春 130012)

摘要: 本文使用波长为2.8 μm的分布式反馈激光器来测量水汽辉光放电产生的物种. 使用浓度调制光谱仅观察到OH自由基和瞬态H₂O分子的吸收光谱. 吸收峰的强度和方向随解调相位而变化, 但是H₂O的一个吸收峰的方向始终与其它峰相反. OH和H₂O的不同光谱取向反映了能级中粒子数量的增加或减少. 如果在放电过程中可以检测到更多的瞬态物种, 则可以更好地研究H₂O的激发、电离和分解动力学. 研究表明, 浓度调制光谱的解调相位关系可以用来研究分子能级的布居数变化.

关键词: 辉光放电, OH自由基, 浓度调制光谱, 布居数变化

吡嗪分子在硅(100)面吸附构型的XPS和NEXAFS谱理论研究 417
宋秀能, 季恒宇, 林娟, 王若宇, 马勇*, 王传奎 (山东师范大学物理

与电子科学学院, 济南 250014)

摘要: 本文利用X射线谱研究了吡嗪(C₄H₄N₂)分子共价吸附于硅(100)面的几种吸附构型的几何结构和电子结构. 利用密度泛函理论结合团簇模型, 对预测的吸附结构的碳K壳层(1s)X射线光电子能谱(XPS)和近边X射线吸收精细结构(NEXAFS)谱进行了模拟. 计算结果阐明了XPS和NEXAFS谱与不同吸附构型的对应关系. 与XPS谱相比, NEXAFS谱对所研究的吡嗪/硅(100)体系的结构有明显的依赖性, 可以很好地用于结构鉴定. 根据碳原子的分类, 研究了在NEXAFS光谱中不同化学环境下碳原子的光谱成分.

关键词: 化学吸附/物理吸附, 表面吸附, X射线吸收光谱, 光电子能谱

二维GaTe/Bi₂Se₃异质结: 一类有潜力的Z型光解水催化剂 .. 427
田淑敏^a, 孟杰^a, 黄静^{b*}, 李群祥^{a*} (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. 安徽建筑大学材料与化工学院, 合肥 230601)

摘要: 本文基于第一性原理方法, 计算了二维GaTe/Bi₂Se₃异质结的电子结构、界面电荷转移、静电势分布、吸收光谱及光催化性质. 计算结果表明异质结是一个小能隙的准直接半导体, 能有效捕获太阳光. 由于相对较强的界面内建极化电场和带边轻微弯曲, 导致异质结中的光生电子和空穴分别有效分离在GaTe单层和Bi₂Se₃薄片上, 可用于析氢和产氧. 这些理论计算结果意味着二维GaTe/Bi₂Se₃异质结是一类有潜力的Z型太阳能全解水催化剂.

关键词: Z型光催化剂, 界面内建电场, 能带匹配, 水解

表面钝化对ZnO纳米线压电性的影响 434
陈功^{a*}, 王攀硕^b (a. 中国科学技术大学物理系, 合肥 230026; b. 复旦大学物理系, 计算物质科学教育部重点实验室, 应用表面物理国家重点实验室, 上海 200433)

摘要: 本文利用第一性原理方法, 研究了四种表面钝化对六角形[001]方向ZnO纳米线压电性质的影响. 研究发现, 在50%H/50%Cl和50%H/50%F两种钝化中, 体积效应和表面效应都起到了增强压电性的作用. 而在100%H和100%Cl的两种钝化中, 表面效应被弱极化的表面电荷屏蔽, 不能起到增强压电性的作用. 此外, 结果还揭示了体积效应和表面效应的竞争使得实验上不能观察到ZnO纳米线压电性的直径依赖现象, 并提出了利用表面钝化缩小纳米线轴向晶格常数或增大表面极化来提高压电性的方法.

关键词: 压电性, ZnO纳米线, 钝化, 第一性原理计算

应力作用下吸附过渡金属原子的蓝磷单层中的拓扑转变 443
胡格, 胡军* (苏州大学物理科学与技术学院, 江苏省薄膜重点实验室, 苏州 215006)

摘要: 本文通过第一性原理计算方法研究了被第四B族过渡金属吸附原子(Cr, Mo, W)修饰的蓝磷单层的电子结构性质, 发现Cr修饰的蓝磷单层为磁性半金属, 而Mo或W修饰的蓝磷单层为半导体, 其带隙均小于0.2 eV. 对Mo或W修饰的蓝磷单层施加双轴压应力使得带隙先闭合再打开, 且在此过程中发生了能带反转的现象, 说明Mo或W修饰的蓝磷单层发生了拓扑转变. Mo和W修饰的蓝磷单层的拓扑转变压应力分别为-5.75%和-4.25%, 其拓扑绝缘带隙分别为94 meV和218 meV. 如此大的拓扑绝缘带隙意味着在较高温度条件下有可能在蓝磷单层中通过吸附过渡金属原子实现拓扑绝缘态.

关键词: 拓扑转变, 蓝磷单层, 过渡金属吸附原子, 双轴应力

二面角弯曲异构体: M₂Pt₂^{0/-}团簇的理论研究 450
曹国进*, 贾秀东 (山西大学, 分子科学研究所, 太原 030006)

摘要: 本文采用密度泛函理论和波函数理论研究了M₂Pt₂^{0/-}团簇(M表示碱土金属元素)在气相中的几何结构和电子性质. 研究表明, 拥有平面结构的D_{2h}异构体比拥有较小二面角及较短Pt-Pt键长的C_{2v}异构体更稳定. M(s,p)与Pt(5d)的相互作用和Pt-Pt共价键之间的相互竞争导致了这两种异构体在稳定性方面有所不同. M(s,p)与Pt(5d)的相互作用支持D_{2h}异构体的平面结构; Pt-Pt共价键作用导致了C_{2v}异构体的弯曲结构. Be₂Pt₂的单重态和三重态的势能曲线有两个不同的交点, 但是Ra₂Pt₂和Ca₂Pt₂⁻的不同多重度的势能曲线间只有一个交点, 这可能是由于三重态Ra₂Pt₂和四重态Ca₂Pt₂⁻较平坦的势能曲线造成的. 上述结果揭示了一个拥有最小原子数的二面角弯曲异构现象, 并且为解释其他潜在的角度弯曲异构体提供了理论帮助.

关键词: 铂, 碱土金属, 角度弯曲异构体, 二面角

程序性死亡蛋白配体1抑制剂2-甲基-3-二苯基甲醇衍生物的定量结

构活性关系研究 459

Abdulla Al Mamun^a, 梅争^a, 邱玲^{b*}, 居学海^{a*} (a. 南京理工大学化工学院, 教育部软化学重点实验室, 南京 210094; b. 江苏省原子医学研究所, 卫生部核医学重点实验室, 无锡 214063)

摘要: 本文研究了二十种2-甲基-3-二苯基甲醇衍生物衍生物作为PD-L1抑制剂的定量结构活性关系. 用密度泛函理论在B3LYP/6-31+G(d,p)水平对它们的结构和性质进行计算, 求得最高占有轨道能级 E_{HOMO} 、最低空轨道能级 E_{LUMO} 、总能量 E_{T} 、偶极矩DM、绝对硬度 η 、绝对电负性 χ 、软度 S 、电负性 ω 和能隙 ΔE 等性质. 用主成分分析(PCA)、多元线性回归(MLR)和多元非线性回归(MNLR)建立它们的定量结构活性关系(QSAR). 基于统计分析构建定量模型并预测化合物的性质. MLR和MNLR统计结果的相关系数 R^2 分别为0.661和0.758. 用留一法交叉检验(LOO-CV), r^2 检验和“Golbraikh Tropsha”标准分析用于检验MLR和MNLR模型的稳健性. 结果表明两种模型均具有统计显著性和稳健性, 两种模型均能预测其生物活性, 可用于PD-L1免疫检查点抑制剂生物活性的预估.

关键词: 定量结构活性关系, 2-甲基-3-二苯基甲醇衍生物, 程序性细胞死亡蛋白配体1抑制剂, 密度泛函理论

多纳米粒子穿越磷脂膜 468

夏萍萍^a, 单月^a, 何林李^a, 季永运^a, 王向红^b, 李士本^{a*} (a. 温州大学物理系, 温州 325035; b. 温州职业技术学院物理系, 温州 325035)

摘要: 本文采用耗散粒子动力学模拟方法研究了多纳米粒子与溶液中的磷脂膜相互作用. 模拟中选择纳米颗粒的形状分别为球状和柱状, 并且在动力学过程中给它们设置了不同的初始速度. 根据纳米粒子穿越膜在动力学过程中体现出不同的特性, 分别定义了几种粒子穿越磷脂的模式, 并且基于粒子之间的相互作用强度和粒子初始速度, 描绘了穿膜模式的详细相图. 本文还进一步研究了体系能量、回旋半径等参数在不同穿越模式中的动力学过程. 研究结果有助于人们理解纳米颗粒穿膜在生命活动过程中的作用.

关键词: 多纳米粒子, 磷脂膜, 穿越模式, 动力学过程

细菌纤维素模板法制备p-Co₃O₄/n-ZnO复合材料及气敏特性研究 477

戚灵莉^{a,b,c}, 钟春燕^d, 邓赞红^{a,c*}, 代甜甜^{a,b}, 常黎青^{a,b}, 王时茂^{a,c}, 方晓东^{a,c,e}, 孟钢^{a,c*} (a. 中国科学院安徽光学精密机械研究所, 安徽光子材料与器件重点实验室, 合肥 230031; b. 中国科学技术大学, 合肥 230026; c. 中国科学院安徽先进激光技术重点实验室, 合肥 230037; d. 海南椰国食品有限公司, 海口 570311; e. 深圳技术大学, 中德智能制造学院, 深圳 518118)

摘要: 本文利用细菌纤维素为模板制备了p型Co₃O₄修饰的n型ZnO纳米复合材料, 通过XRD、SEM、HRTEM、EDS和XPS等手段对纳米复合材料的组成、形貌与元素分布进行了相应的表征. 相对于纯ZnO来说, p-Co₃O₄/n-ZnO复合材料对有机挥发性气体响应的灵敏度有明显提升, 例如复合材料对100 ppm丙酮的灵敏度为63.7(最佳温度为180 °C), 是纯ZnO(最佳温度为240 °C, 灵敏度为2.3)的26倍. 从材料表面氧空位(缺陷控制)、Co₃O₄的催化活性以及p-n 异质结三个方面解释了复合材料对VOCs的高响应特性. 同时细菌纤维素可以作为模板设计功能化的异质结复合物用于VOCs的测试或者其他应用.

关键词: 细菌纤维素, 异质结, 金属氧化物复合物, ZnO, 气体传感器

Mn₃O₄包覆对LiNi_{0.5}Mn_{1.5}O₄正极材料界面电化学性能的提高 485

邓苗苗^{a,b}, 张大伟^a, 邵宇^b, 贺晓东^b, Aqsa Yasmin^b, 陈春华^{b*} (a. 合肥工业大学化学与化工学院, 合肥 230009; b. 中国科学技术大学化学与材料科学学院, 合肥 230026)

摘要: 本文采用化学湿磨法, 首次将金属氧化物Mn₃O₄包覆于LiNi_{0.5}Mn_{1.5}O₄颗粒表面, 使得电极材料的电子电导率从 1.53×10^{-7} S/cm 提高到 3.15×10^{-5} S/cm. 电化学测试结果表明Mn₃O₄包覆大大提高LiNi_{0.5}Mn_{1.5}O₄正极材料的倍率性能和高温循环稳定性. 最佳包覆样品为2.6wt% Mn₃O₄包覆的LiNi_{0.5}Mn_{1.5}O₄, 在10 C倍率下具有108 mAh/g的高放电容量并且在55 °C下100次循环后仍有78%的容量保持率, 远大于未包覆样品67%的容量保持率.

关键词: 锂离子电池, 正极材料, 尖晶石镍锰金属氧化物, 表面改性

MoO_{3-x}/PCN的原位合成及其增强光催化产氢性能的研究 491

戚荣杰^{a,b}, 刘军营^{a,b}, 韦之栋^{a,b}, 郭伟琦^{a,b}, 江治^{a,b*}, 上官文峰^{a,b} (a. 上海交通大学燃烧与环境技术研究中心, 上海 200240; b. 上海交通大学氢科学中心, 上海 200240)

摘要: 本文通过简单的一步浸渍煅烧法原位合成了氧化钼纳米晶/聚合物氮化碳复合光催化剂, 该不含铂基助催化剂的氧化钼修饰聚合物氮化碳光催化剂在可见光照射下表现出增强的光催化产氢性能, 最高产氢速率为15.6 $\mu\text{mol/h}$, 是普通聚合物氮化碳样品的3倍以上. 相应的结构与性能的分析表明, 与后浸渍法不同, 在原位生长过程中高分散的超小氧化钼纳米晶体与聚合物氮化碳之间形成了紧密的耦合界面结构, 可见光产氢活性的提升源自高分散的超小氧化钼纳米晶与聚合物氮化碳之间形成的紧密界面, 以及该界面结构形成的肖特基结带来的有效电荷载流子转移.

关键词: 非贵金属助催化剂, 聚合物氮化碳, 氧化钼, 肖特基结, 光催化制氢

大规模合成具有氧空位的多孔Bi₂O₃用于有效降解亚甲基蓝 500

王利容^a, 侯婷婷^a, 辛月^a, 竹文坤^b, 余术宜^{a*}, 谢子斌^a, 梁叔全^{a*}, 王梁炳^{a*} (a. 中南大学材料科学与工程学院粉末冶金国家重点实验室, 长沙 410083; b. 西南科技大学环境友好能源材料国家重点实验室, 绵阳 621010)

摘要: 光催化降解有机污染物由于其具有低能耗和绿色环保的特点, 已经成为研究的热点. 氧化铋纳米晶体的带隙在2.0~2.8 eV之间, 利用它催化可见光降解有机污染物具有较高的活性, 从而引起了越来越多的关注. 尽管近年来已经开发了几种制备Bi₂O₃基半导体材料的方法, 但是仍然难以用简单的方法大规模地制备高活性的Bi₂O₃催化剂. 因此, 开发简单可行的大规模制备Bi₂O₃纳米晶体的方法对于工业废水处理的潜在应用具有重要意义. 本文通过蚀刻商用BiSn粉末, 然后进行热处理, 成功地大规模制备了多孔Bi₂O₃. 获得的多孔Bi₂O₃在亚甲基蓝(MB)的光催化降解中表现出优异的活性和稳定性. 对该机理的进一步研究表明, 多孔Bi₂O₃合适的能带结构允许生成活性氧物种, 例如O₂⁻和·OH, 可有效降解MB.

关键词: Bi₂O₃光催化剂, 光催化降解, 大规模, 可见光, 光催化