

## Chinese Abstracts

## 本期中文摘要

- F+HD→DF+H反应的高分辨交叉分子束散射研究** ..... 551  
王兴安<sup>a</sup>, 车丽<sup>a</sup>, 任泽峰<sup>a</sup>, 邱明辉<sup>a,b</sup>, 戴东旭<sup>a</sup>, 王秀岩<sup>a</sup>, 杨学明<sup>a\*</sup> (a. 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; b. 大连交通大学物理系, 大连 116028)  
**摘要:** 采用高分辨的氢原子里德堡态标识的飞行时间谱技术, 对F+HD→DF+H反应进行了交叉分子束研究. 在2.51~5.60 kJ/mol的8个碰撞能下, 测得了部分转动态分辨的微分截面. 实验结果显示, 反应产物角分布表现出显著的后向散射, 随着碰撞能的提高, 角分布会逐渐变宽. 确定了产物振动态分支比随碰撞能变化的关系. 结果显示产物DF表现出高度振动态反转布居, 其中DF( $v'=3$ )态是布居数最高的产物态, 在3.97 kJ/mol以上还探测到产物DF( $v'=1$ )的信号.  
**关键词:** F+HD→DF+H, 交叉分子束, 里德堡态标识, 后向散射
- 蛋白质盐效应研究的新方法: 红外吸收强度分析** ..... 556  
李恒, 徐妍妍, 翁羽翔\* (中国科学院物理研究所软物质物理实验室, 北京凝聚态物理国家实验室, 北京 100080)  
**摘要:** 通过观测红外光谱的强度变化研究了在不同温度下盐离子对谷氨酸和三种水溶性蛋白质(细胞色素C、DsbC和DsbC-G49R)的影响. 证实了Onsager反应场理论. 区分并且定义了随温度变化的蛋白质盐效应盐溶过程和解离过程. 同时利用Van't Hoff关系式对实验结果进行线性拟合, 获得了蛋白质及其二级结构在上述两个过程中的热力学常数.  
**关键词:** 红外吸收强度, 盐效应, 傅立叶红外光谱, 二级结构, 热力学常数
- DNA碱基单体和Watson-Crick 碱基对的非谐性振动特征** ... 563  
王桂秀, 马肖燕, 王建平\* (北京分子科学国家实验室, 分子反应动力学国家重点实验室, 中国科学院化学研究所, 北京 100190)  
**摘要:** 在密度泛函理论水平上研究了从DNA碱基单体到Watson-Crick碱基对的结构、电荷分布、以及非谐性振动参数的变化. 通过研究与碱基对中多重氢键的NH<sub>2</sub>、N-H和C=O的伸缩振动模式, 预测了这些模式的对角非谐性常数、非对角非谐性常数、以及非谐性振动耦合对碱基结构变化的敏感性. 研究结果揭示了DNA碱基中非谐性振动态、分子间氢键和静电相互作用之间的内在联系.  
**关键词:** 非谐性振动, 非谐性常数, 耦合, 二维红外光谱, DNA碱基
- 激光诱导的二氧化碳分子取向和库仑爆炸** ..... 571  
吴成印\*, 姜洪岩, 吴志峰, 龚旗煌 (人工微结构和介观物理国家重点实验室, 北京大学物理学院, 北京 100871)  
**摘要:** 实验研究了CO<sub>2</sub>分子在飞秒强激光脉冲作用下的动力学过程, 包括分子取向, 隧穿电离和库仑爆炸, 激光强度从 $1 \times 10^{13}$  W/cm<sup>2</sup>变化到 $6 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>. 当激光强度小于分子的电离阈值时, CO<sub>2</sub>分子的非绝热转动激发形成一个相干转动波包, 波包演化导致分子沿激光电场方向取向. 激光脉冲结束后, 分子取向可以周期性地再现, 利用另一束激光可以对取向结构进一步进行修饰. 当激光强度大于分子的电离阈值时, CO<sub>2</sub>分子发生隧穿电离和库仑爆炸. 实验观察到爆炸产生的原子离子C<sup>m+</sup> ( $m=1\sim3$ )和O<sup>n+</sup> ( $n=1\sim3$ )相对于激光偏振方向呈现高度的各向异性分布. 采用偏振相互垂直的双脉冲法, 原子离子的各向异性分布来源于激光脉冲上升沿使分子在电离前沿激光电场方向发生的取向.  
**关键词:** 转动波包, 无外场取向, 库仑爆炸
- 甘氨酸-甲醇团簇的DFT计算** ..... 577  
邹昊, 胡勇军\*, 邢达 (华南师范大学生物光子学研究院激光生命科学研究所暨激光生命科学教育部重点实验室, 广州 510631)  
**摘要:** 应用DFT计算方法研究了中性和离子甘氨酸-甲醇氢键团簇Glycine-(CH<sub>3</sub>OH)<sub>n</sub> ( $n=1\sim6$ ). 对中性和离子的甘氨酸与1~6个甲醇分子组成系列团簇的初始构型在B3LYP/6-13+G\*水平下进行全优化, 确定最低能量稳定构型, 并对其氢键结构进行分析. 理论预测表明, 当 $n \leq 3$ 时, 在最稳定的中性构型中, 所有甲醇分子优先聚集在羧基附近; 而在离子构型中, 甲醇分子可在氨基和羧基之间形成键桥, 且该构型为最稳定构型. 当团簇中的甲醇数量达到5和6时, 两种最稳定构型(中性和离子)的能量趋向等同.  
**关键词:** 微溶剂化, 氨基酸, 甲醇, DFT, 氢键团簇
- 苯甲醛S<sub>2</sub>态附近的实时光解动力学** ..... 587  
刘本康<sup>a,b</sup>, 王丙星<sup>a,b</sup>, 王艳秋<sup>a</sup>, 王利<sup>a\*</sup> (a. 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; b. 中国科学院研究生院, 北京 100049)  
**摘要:** 利用飞秒泵浦-探测方法结合飞行时间质谱研究了苯甲醛在不同泵浦波长260、271、284和287 nm下的超快动力学. 在S<sub>2</sub>区( $\lambda < 284$  nm), 受激分子首先经过内转换过程到S<sub>1</sub>高振动态, 实验观察到这个过程随着S<sub>2</sub>态分子振动能量的增加而变快, 可能源于高振动能级密度导致S<sub>2</sub>与S<sub>1</sub>之间内转换加快. 双指数拟合的第二个过程(约600 fs)认为可能是由于内转换后在S<sub>1</sub>态发生的振动弛豫过程. 当激发波长为287 nm时, 苯甲醛被激发到S<sub>1</sub>高振动态, 双指数模型中的第一个成分衰减变快, 约56 fs, 是由于S<sub>1</sub>与T<sub>2</sub>的强耦合形成的系间穿越到T<sub>2</sub>态的过程; 另一个约600 fs的过程为S<sub>1</sub>态的振动弛豫. 碎片C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>CO<sup>+</sup>的实验结果表明解离过程主要发生在母体分子电离之后.  
**关键词:** 苯甲醛, 超快过程, 飞秒泵浦
- 和频振动光谱定量表面手性测量中的双偏振角方法** ..... 592  
魏锋<sup>a</sup>, 徐妍妍<sup>b</sup>, 郭源<sup>b</sup>, 刘世林<sup>a</sup>, 王鸿飞<sup>b\*</sup> (a. 中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室, 化学物理系, 合肥 230026; b. 北京分子科学国家实验室, 分子动态与稳态结构国家重点实验室中国科学院化学研究所, 北京 100190)  
**摘要:** 介绍了一种新的表面和频振动光谱方法: 定量手性检测中的双偏振角方法. 一般来讲表面光谱信号中非手性项贡献最强, 而纯界面手性信号要比非手性信号弱两到三个数量级. 因此在和频振动光谱定量测量和分析界面手性的贡献问题上存在困难. 在和频振动光谱的双偏振角方法中, 通过固定入射红外光偏振方向, 并同时改变入射可见光和初涉和频信号光的偏振角进行测量. 这样所得到的偏振依赖的和频振动光谱信号能够直接给出界面手性贡献的特征, 并且能够用于准确测量界面的手性和非手性贡献. 对双偏振角方法进行了描述, 并且通过S和R手性的柠檬烯空气/液体界面的和频振动光谱测量验证了双偏振角方法实用性. 对柠檬烯的S-和R-手性对应体在2878波数处振动峰的测量得到的最准确的表面手性过量值分别为23.7±0.4%和-25.4±1.3%.  
**关键词:** 和频振动光谱, 双偏振角, 表面, 手性, 柠檬烯
- Cl(<sup>2</sup>P<sub>3/2</sub>, <sup>2</sup>P<sub>1/2</sub>)+H<sub>2</sub>反应的新的从头算势能面** ..... 601  
蒋彬, 谢代前\* (南京大学化学化工学院理论与计算化学研究所, 教育部介观化学重点实验室, 南京 210093)  
**摘要:** 采用多参考组态相互作用的计算方法和很大的基组构造了Cl+H<sub>2</sub>反应体系的一组新的三维从头算势能面. 该势能面包含Cl+H<sub>2</sub>体系的能量最低的三个绝热态, 并在非绝热近似下转化为四个非绝热势能面. 另外, 旋轨耦合矩阵元也基于Breit-Pauli Hamiltonian计算得到. 对角化这四个非绝热势能和两个旋轨耦合矩阵元组成的全耦合Hamiltonian, 得到了三个考虑旋轨耦合后的绝热势能面. 基于这组新势能面的非绝热动力学计算结果与最新的实验符合得很好, 很好地解释了在这个反应中的非绝热效应.  
**关键词:** 从头算势能面, 非绝热, 旋轨耦合, Cl(<sup>2</sup>P)+H<sub>2</sub>→HCl+H
- 十种醇的电晕放电离子迁移谱** ..... 605  
韩海燕<sup>a</sup>, 王鸿梅<sup>a</sup>, 江海河<sup>a</sup>, Michal Stano<sup>b</sup>, Martin Sabo<sup>b</sup>, Stefan Matejcek<sup>b</sup>, 储焰南<sup>a\*</sup> (a. 中科院安徽光学精密机械研究所环境光谱学研究室, 合肥 230031; b. 斯洛伐克柯阿美纽斯大学实验物理系, Bratislava 84248)  
**摘要:** 利用电晕放电离子源离子迁移谱装置对十种醇类有机物的迁移谱进行了研究. 在质子化的水合氢离子为反应离子和纯净空气为迁移气体的条件下, 各种醇类有机物在其离子迁移谱中都获得了不同的产物离子峰. 利用指数稀释法得到各种样品的检测限在几个pmol/L量级. 利用所得到的离子迁移谱, 以硬球碰撞为模型, 得到了大气压离子-分子相互作用的多个化学物理参数, 包括离子-分子碰撞、扩散系

数、碰撞速率常数和离子半径.

**关键词:** 约化迁移率, 硬球模型, 离子-分子碰撞参数

**NiII的光腔衰荡吸收光谱** ..... 611  
马彤梅, 李凌, 梁詠霞, 张仕中\* (香港大学化学系, 香港)

**摘要:** 用激光蒸发/反应、超声射流和光腔衰荡吸收光谱方法研究NiII在445~510 nm的吸收光谱. 发现两个新的跃迁体系 $[21.3]^2\Delta_{5/2} \sim X^2\Delta_{5/2}$ 和 $[21.9]^2\Pi_{3/2} \sim X^2\Delta_{5/2}$ , 并且观察到了同位素分子 $^{58}\text{NiII}$ 和 $^{60}\text{NiII}$ 光谱. 同时计算得到了电子态 $[21.3]^2\Delta_{5/2}$ 和 $[21.9]^2\Pi_{3/2}$ 的分子平衡常数, 其中两个电子态的键长分别为2.431和2.481 Å.

**关键词:** 碘化镍, 光腔衰荡, 电子跃迁

**钛原子激发态光电离截面测量** ..... 615  
杨家君, 胡行勇, 吴红霞, 樊建梅, 从然, 程颐, 季学韩, 姚关心, 郑贤锋\*, 崔执凤 (安徽师范大学原子与分子物理研究所, 芜湖241000)

**摘要:** 实验研究了钛原子在293~321 nm波段的共振增强多光子电离. 采用激光烧蚀和超声射流相结合的实验技术来制备自由原子, 由飞行时间质谱仪实现对钛原子光电离产物的检测. 从离子信号强度对和激光强度的依赖关系导出了钛原子价电子激发态的光电离截面. 实验测量的一些激发态光电离截面在0.2~6.0 Mb. 通过对 $^{46}\text{Ti}$ 、 $^{47}\text{Ti}$ 、 $^{48}\text{Ti}$ 的光电离截面测量研究, 没有发现明显的同位素依赖性.

**关键词:** 光电离截面, 激发态, 钛原子

**利用反应显微成像谱仪确定电荷转移反应中分子轴的取向** ..... 621  
张少锋<sup>a,b</sup>, 马新文<sup>a\*</sup>, 朱小龙<sup>a</sup> (a. 中国科学院近代物理研究所, 兰州730000; b. 中国科学院研究生院, 北京100049)

**摘要:** 基于在近代物理研究所建成的反应显微成像谱仪, 实验研究了在分子离子与He原子碰撞中的电荷转移反应机制. 通过运动学完全测量实验充分展示了此碰撞体系的特征. 由于采用了符合测量技术和数据列表模式记录数据, 因此实验记录了每个事件中因分子离子解离而产生的碎片的三维动量信息. 在离线数据分析和处理中, 根据解离碎片的动量可以确定每个事件中的 $\text{H}_2^+$ 分子离子的分子轴取向. 在近轴反冲核近似下, 可以认为实验测量得到的分子轴取向就是电荷交换碰撞时刻分子轴的取向. 实验中分子轴取向的角分辨是 $\pm 8^\circ$ .

**关键词:** 反应显微成像谱仪, 成像技术, 分子轴取向, 氢分子离子, 解离

**分子动力学模拟胰岛素在石墨烯表面的稳定性** ..... 627  
梁立军, 王琦\*, 吴韬\*, 沈嘉炜, 康玉 (浙江大学化学系, 杭州310027)

**摘要:** 通过分子动力学模拟研究了胰岛素与不同尺寸石墨烯的相互作用, 并比较了固定的石墨烯与不固定的石墨烯对蛋白质吸附行为及动力学的影响. 通过分析胰岛素蛋白在吸附过程中构象与取向的变化和吸附过程的动力学行为证实了石墨烯对胰岛素蛋白的有效吸附. 通过对蛋白质结构的分析发现蛋白质的三级结构在所有的体系中有不同程度的破坏, 而蛋白质二级结构的稳定性则与体系有关, 其中非固定的石墨烯因其具有较大柔性而表现出对蛋白质二级结构的破坏具有一定选择性. 同时还发现石墨烯的尺寸对于胰岛素的吸附动力学过程也有较大影响.

**关键词:** 胰岛素, 石墨烯, 相互作用, 动力学过程, 有效吸附, 结构稳定性

**乙烯在化学计量锆氧阳离子团簇上脱氢反应的** ..... 635  
吴晓楠<sup>a,b</sup>, 赵艳霞<sup>a,b</sup>, 何圣贵<sup>a\*</sup>, 丁迅雷<sup>a\*</sup> (a. 北京分子科学国家实验室, 中国科学院化学研究所分子动态与稳态结构国家重点实验室, 北京100190; b. 中国科学院研究生院, 北京100049)

**摘要:** 使用配有团簇产生和化学反应源的飞行时间质谱装置, 研究了锆氧阳离子团簇 $\text{Zr}_x\text{O}_y^+$ 和乙烯的反应. 在这个反应中, 发现了产物 $(\text{ZrO}_2)_x\text{H}^+$  ( $x=1\sim 4$ ). 使用密度泛函理论研究了乙烯在 $\text{Zr}_2\text{O}_4^+$ 上的反应通道, 发现除了通常的氧转移反应外, 乙烯脱氢反应也可以发生, 从而支持观察到的产物 $(\text{ZrO}_2)_x\text{H}^+$  ( $x=1\sim 4$ )来自反应 $(\text{ZrO}_2)_x^+ + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow (\text{ZrO}_2)_x\text{H}^+ + \text{C}_2\text{H}_3$  ( $x=1\sim 4$ ). 并且使用Rice-Ramsberger-Kassel-Marcus方法, 计算了反应速率.

**关键词:** 飞行时间质谱仪, 锆氧化物团簇, 快速流动管反应器, 反应活性, 密度泛函理论, RRKM理论

**$\text{CF}_x\text{Cl}_{4-x}$ 分子 $4a_1$ 轨道在低动量区域的电子动量分布: 分子几何构型扭曲的可能证据** ..... 642  
单旭, 徐春凯, 尹晓峰, 周丽霞, 徐克尊, 陈向军\* (中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室, 近代物理系, 合肥230026)

**摘要:** 由于低动量区域理论和实验的严重差异, 重新分析了系列氟利昂分子 $\text{CF}_3\text{Cl}$ 、 $\text{CF}_2\text{Cl}_2$ 和 $\text{CFCl}_3$  ( $\text{CF}_x\text{Cl}_{4-x}$ ,  $x=1\sim 3$ )的 $4a_1$ 轨道的电子动量分布. 利用分子离子的平衡几何构型计算得到的动量分布极大地改善了, 与实验数据之间的吻合, 这一结果表明在 $p < 0.5$  a.u.区域实验观测到的偏高的动量分布值可能是电离瞬间分子构型的扭曲带来的. 进一步的分析还显示了这种分子构型扭曲对C-Cl成键电子密度分布的影响是低动量端差异主要来源.

**关键词:** (e, 2e), 电子动量谱学, 分子构型扭曲, 电子密度分布

**质量分辨的阈值电离光谱对对位乙氧基苯酚的不同构型的离子态特性研究** ..... 649

郑秋莎<sup>a,b,c</sup>, 方腾毅<sup>a</sup>, 张冰<sup>b</sup>, 曾文碧<sup>a\*</sup> (a. 中央研究院原子与分子科学研究所, 台北; b. 中国科学院武汉物理与数学研究所, 波谱与原子分子物理国家重点实验室, 武汉430071; c. 中国科学院研究生院, 北京100049)

**摘要:** 利用双色双光子质量分辨的阈值电离光谱技术, 研究了对位乙氧基苯酚顺式和反式两种构型的离子态振动特性. 测得顺式和反式精确的绝热电离势分别为 $61565 \pm 5$ 和 $61670 \pm 5$   $\text{cm}^{-1}$ . 与对位乙氧基苯酚实验结果比较, 顺式和反式的测得的绝热电离势分别降低了645和643  $\text{cm}^{-1}$ . 从所得到的两种构型的高分辨离子态光谱中, 可知顺式和反式不同构型对苯环平面的振动影响很小, 而低频率的C-OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>弯曲振动在两种构型中都活跃.

**关键词:** 质量分辨的阈值电离光谱, 对位乙氧基苯酚, 离子态, 振动

**改装反射式飞行时间质谱装置用于光解质量选择的团簇离子** ... 655

赵雨超, 张增光, 袁金云, 许洪光, 郑卫军\* (北京分子科学国家实验室(筹), 中国科学院化学研究所分子反应动力学国家重点实验室, 北京100190)

**摘要:** 介绍了一种改进的反射式飞行时间质谱装置用于光解质量选择的团簇离子. 该装置中采用了“选质-减速-解离-再加速”的方式. 团簇离子在反射式飞行时间的一级聚焦点被选质, 接着被减速, 并且立即被光解, 光解所产生的碎片以及没有被光解的母体离子被重新加速, 这一系列过程都在靠近一级聚焦点的位置完成. 相对文献中报道的其他方式, 采用这一方式更利于光解碎片和母体离子的分离, 更容易确定光解激光的触发时间, 同时, 由于母体离子在一级聚焦点的空间分布比较窄, 也有利于光解激光束照射到所有的团簇离子, 从而提高光解效率. 对母体离子、碎片离子的飞行时间进行了计算, 并且给出了标定碎片离子质量的简化表达式.

**关键词:** 反射式飞行时间质谱, 激光光解, 质量选择, 团簇

**高灵敏的激光衰荡光谱研究 $\text{C}_2\text{H}_2$ 在 $12300$   $\text{cm}^{-1}$ 附近的泛频谱带** .

..... 663  
高波, 刘安雯, 吴瑞雪, 宁威, 胡水明\* (中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室, 化学物理系, 合肥230026)

**摘要:** 利用单模连续的钛宝石激光器, 构建了一台光腔衰荡光谱仪, 其可探测的最小吸收可达 $1.8 \times 10^{-10}$  /cm. 该光谱仪被用来记录 $\text{C}_2\text{H}_2$ 分子在 $12240 \sim 12350$   $\text{cm}^{-1}$ 的泛频光谱. 与在同一波段测量的已报到的CRDS和激光腔内吸收光谱仪结果比较, 本测量同时具有更好的灵敏度和精度. 由此, 获得了乙炔分子在 $12290.12$ 、 $12311.82$ 和 $12350.61$   $\text{cm}^{-1}$ 附近高泛频谱带更准确的振转参数. 作为该光腔衰荡光谱仪的优点的另一个体现, 还发现了极微弱的 $12289$   $\text{cm}^{-1}$ 谱带的f支出现的微扰, 并对其特性进行了研究. 该谱仪的定量测量能力由对水线吸收的测定所验证, 并被用以给出以上三个乙炔谱带的绝对带强度.

**关键词:** 光腔衰荡, 乙炔, 近红外, 泛频光谱

**NiS自由基在 $15500 \sim 17200$   $\text{cm}^{-1}$ 的激光诱导荧光激发谱** ... 668

甄军锋, 王莉, 秦成兵, 张群, 陈咏\* (中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室, 化学物理系, 合肥230026)

**摘要:** 测量了在 $15500\sim 17200\text{ cm}^{-1}$ 的超声射流冷却的NiS自由基的激光诱导荧光激发谱. 15条谱带被归属为三个电子态激发态分别为:  $[15.65](v'=0\sim 4)\sim X(v''=0)$ ,  $[15.69](v'=0\sim 4)\sim X(v''=0)$ , 和 $[15.81](v'=0\sim 4)\sim X(v''=0)$ . 三个新发现的电子激发态的光谱常数为首次确定. 此外, 大多数观察的振动带的寿命也得到了测量.

**关键词:** NiS, 光谱, 激光诱导荧光, 直流放电

**自由基反应 $\text{C}_2\text{HCl}_2 + \text{O}_2$ : TR-FTIR光谱和电子结构计算的结合**

..... 673  
向天成<sup>a,b</sup>, 王欢<sup>a</sup>, 刘坤辉<sup>a</sup>, 赵红梅<sup>a</sup>, 吴为强<sup>a</sup>, 苏红梅<sup>a\*</sup> (a. 北京分子科学国家实验室, 分子动态与稳态结构国家重点实验室中国科学院化学研究所, 北京 100190; b. 许昌学院化学与化工学院, 许昌 461000)

**摘要:** 用时间分辨傅立叶变换红外发射光谱(TR-FTIR)和G3MP2//B3LYP/6-311G(d,p)水平的电子结构计算研究了环境化学中重要的二氯代乙烯自由基 $\text{C}_2\text{HCl}_2$ 和 $\text{O}_2$ 分子的基元反应通道和机理. 通过 $0.5\text{ cm}^{-1}$ 高分辨的TR-FTIR发射光谱观察到三种振动激发态产

物 $\text{CO}_2$ 、CO和HCl, 由光谱拟合得到CO和HCl的振动态分布, 结合电子结构计算的反应势能曲线, 提出反应机理和能量上最可能的反应途径.

**关键词:** TR-FTIR, G3MP2, 自由基反应,  $\text{C}_2\text{HCl}_2$

**对氨基苯甲酸266 nm生成OH自由基的光解动力学**..... 681

周灿华, 程世博, 尹鸿鸣\*, 何国钟 (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)

**摘要:** 利用激光诱导荧光光谱方法研究了对氨基苯甲酸在266 nm条件下光解生成的OH自由基的高分辨振转光谱. 研究发现OH自由基几乎处于振动基态并且它的转动布居符合波尔兹曼分布, 转动温度可表征为 $1040\pm 110\text{ K}$ , 相对应的转动能为 $8.78\pm 0.84\text{ kJ/mol}$ . 在 $^2\Pi_{3/2}$ 和 $^2\Pi_{1/2}$ 旋轨耦合态中, 前者布居占多数; 并且 $\Lambda$ 分裂态的 $\Pi(A')$ 态占优. 最后讨论了OH自由基来自对氨基苯甲酸光解可能的解离机理.

**关键词:** 光解, OH自由基, 对氨基苯甲酸, 激光诱导荧光技术