

## Chinese Abstracts (中文摘要)

**荧光色散谱对FeS( $X^5\Delta$ )振动常数的实验确认** ..... 1  
王莉, 黄道菱, 甄军锋, 张群\*, 陈昉\* (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:** 基于之前的激光诱导荧光激发谱工作, 采用激光诱导荧光色散谱技术直接探测中性FeS基电子态 $X^5\Delta$ 振动能级到 $v''=3$ 而获得其振动常数. 所得FeS( $X^5\Delta$ )振动频率值( $518\pm 5\text{ cm}^{-1}$ )和最近的光电子能谱测量值( $520\pm 30\text{ cm}^{-1}$ ) [J. Phys. Chem. A **107**, 2821 (2003)]符合得较好, 该光电子能谱测量值是之前唯一报道的FeS电子态振动频率的实验值. 通过比较实验结果和相关文献(主要来自理论预测), 确定FeS的基态是 $X^5\Delta$ 态.

**关键词:** FeS, 振动常数, 激光诱导荧光色散谱

**交叉分子束研究氯原子与硅烷的反应动力学** ..... 4  
肖重发, 沈关林, 王秀岩, 杨学明\* (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:** 利用通用型交叉分子束研究了氯原子与硅烷的反应, 观测到 $\text{SiH}_3\text{Cl}+\text{H}$ 通道. 测量到产物 $\text{SiH}_2\text{Cl}$ 在实验坐标下的角度分辨的飞行时间谱, 获得了这个通道质心坐标下的产物角分布和动能分布. 结果表明, 相对于氯原子束方向, 产物 $\text{SiH}_2\text{Cl}$ 主要是向后散射, 说明这个通道主要是通过典型的交叉分子束亲核取代反应( $\text{S}_\text{N}2$ )机理进行的.

**关键词:** 氯原子, 硅烷,  $\text{S}_\text{N}2$ 机理, 通用型交叉分子束

**光腔衰荡光谱研究 $\text{PH}_2$ 自由基在465–555 nm的光谱** ..... 8  
赵东锋, 秦成兵, 张群, 陈昉\* (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:** 采用光腔衰荡光谱记录了465–555 nm范围内 $\text{PH}_2$ 自由基在射流冷却条件下的吸收光谱. 在超声射流条件下对氩载气中的 $\text{PH}_3$ 和 $\text{SF}_6$ 混合物直流放电产生 $\text{PH}_2$ 自由基. 得到了7个有精细转动结构的振转谱带, 并归属为 $\text{PH}_2$ 自由基 $\tilde{A}^2\text{A}_1-\tilde{X}^2\text{B}_1$ 电子跃迁的 $0_0^0$ 、 $2_0^0$ 、 $2_1^0$  ( $n=1-3$ )跃迁. 在已有的基础上, 重新归属每一个振转谱带的转动量子数和转动项值; 进一步精细化转动常数、离心畸变常数和自旋转动相互作用常数. 另外还简单讨论了每个K结构受到其它电子态的干扰.

**关键词:**  $\text{PH}_2$ 自由基, 直流放电, 光腔衰荡光谱

**双分子水和氨气催化 $\text{CF}_3\text{OH}$ 分子裂解的理论研究** ..... 16  
龙波<sup>a\*</sup>, 谭兴凤<sup>b</sup>, 隆正文<sup>c</sup>, 任达森<sup>a\*</sup>, 张为俊<sup>d</sup> (a. 贵州民族学院计算机与信息工程学院, 贵阳 550025; b. 重庆邮电大学光电工程学院, 重庆 400065; c. 贵州大学物理系, 贵阳 550025; d. 中国科学院安徽光学精密机械研究所环境光学实验室, 合肥 230031)

**摘要:** 利用G3和CBS-QB3的理论方法研究 $\text{CF}_3\text{OH}$ 分子裂解成FCFO和HF, 并考虑大气中双分子和氨气对 $\text{CF}_3\text{OH}$ 分子裂解的催化作用. 理论计算表明: 由于在G3的理论水平下, 计算的能垒为188.52 kJ/mol, 所以 $\text{CF}_3\text{OH}$ 分子在大气条件下不可能发生单分子裂解; 当氨气和双分子水被加入时, 能垒都被降到25.08 kJ/mol, 起了强的催化作用. 除此之外, 应用过渡态理论对速率常数进行了计算, 计算结果表明: 氨气催化 $\text{CF}_3\text{OH}$ 分子的速率常数是单分子和双分子催化 $\text{CF}_3\text{OH}$ 分子裂解速率常数的 $10^9$ 和 $10^5$ 倍. 考虑到大气中这些物质的浓度, 计算结果预测了氨气催化 $\text{CF}_3\text{OH}$ 分子裂解在大气中起到重要的作用.

**关键词:**  $\text{CF}_3\text{OH}$ , 氨气, 量化计算, 速率常数, 反应机理

**石墨烷纳米条带阵列中的近自由电子态** ..... 22  
刘巧鸿, 李震宇, 杨金龙\* (中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室, 合肥 230026)

**摘要:** 基于第一性原理计算, 在石墨烷纳米条带阵列中找到类似于石墨烯纳米条带阵列的两种近自由电子态. 研究了电子掺杂对这些近自由电子态的影响, 发现有可能通过掺杂打开一条真空中的输运通道.

**关键词:** 石墨烷, 近自由电子带, 电子结构

**寡聚(亚硅基二炔基萘)电子结构和光谱性质的密度泛函理论研究** ..... 25  
张培斌<sup>a,b</sup>, 黄昕晔<sup>b</sup>, 李歆<sup>a</sup>, 滕启文<sup>a\*</sup> (a. 浙江大学化学系, 杭州 310027; b. 浙江大学高分子科学与工程系, 杭州 310027)

**摘要:** 聚(亚硅基二炔基萘)(PSDEA)经实验测定具有空穴传输的能力. 为了模拟此高聚物的性质, 设计了一系列亚硅基二炔基萘(SDEA)的寡聚物, 利用密度泛函理论方法在B3LYP/6-31G(d)水平上对其构型进行优化. 寡聚物的能隙随着链长的增加而减少, 同时萘环上吸电基团的存在也使能隙减少. 在B3LYP/6-31G水平上计算寡聚物的 $^{13}\text{C}$ 化学位移以及萘环中心位置的核独立化学位移. 寡聚物中与硝基相连的碳原子的化学位移与未连硝基的寡聚物中相同碳原子的

化学位移相比向高场移动. 萘环中心的芳香性在吸电子基团存在时减弱, 但随着亚硅基数目的增加而增强. 用于核独立化学位移计算的最敏感区域是萘环上方0.1 nm处.

**关键词:** 亚硅基二炔基萘寡聚物, 导电高聚物, 核独立化学位移扫描, 密度泛函理论

**价电子均衡电负性及其应用** ..... 31  
武亚新<sup>a,b</sup>, 曹晨忠<sup>b\*</sup>, 袁华<sup>b</sup> (a. 中南大学化学化工学院, 长沙 410083; b. 湖南科技大学化学化工学院, 湘潭 411201)

**摘要:** 提出一种不同于传统方法的价电子均衡方法来计算均衡电负性, 包括分子电负性、基团电负性和原子电荷. 用分子电负性对烷烃和单取代烷烃分子的第一电离能进行关联, 用基团电负性对某些分子的 $^1\text{H}$  NMR谱化学位移进行关联, 用原子电荷对脂肪族胺、醇和醚分子的气相碱性进行关联. 所得各回归方程均有良好的相关性. 同时还在价电子均衡方法的基础上对Sanderson方法和Bratsch方法进行了修正, 用于关联上述各性能, 结果表明比相应的原方法更为有效.

**关键词:** 电负性均衡, 价电子均衡方法, 分子电负性, 基团电负性, 原子电荷

**具有空穴传输性能高效蓝光咔唑衍生物** ..... 40  
欧阳新华<sup>a,b\*</sup>, 曾和平<sup>a\*</sup> (a. 华南理工大学化学与化工学院功能分子研究所, 广州 510641; b. 南昌航空大学环境与化学工程学院, 南昌 330063)

**摘要:** 合成了一种新颖的具有空穴传输性能的咔唑衍生物, 其化学结构使用电子电离质谱、氢核磁共振、元素分析鉴定. 系统地研究了该化合物的吸收性质、光致发光性质和热稳定性, 结果发现该化合物在室温下表现出稳定的蓝光发射, 发光波长位于461 nm处; 并且在常温下表现出好的热稳定性. 为了更进一步研究其发光和空穴传输性能, 设计了四种不同结构的电致发光器件, 系统地研究了它的发光性能和电荷传输性能, 结果发现, 最大蓝光发光亮度达到3526 cd/m<sup>2</sup>, 其色坐标是(0.20, 0.24), 其发光效率达到1.56 cd/A (10 V).

**关键词:** 蓝光发射, 咔唑衍生物, 电致发光

**$\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{S}(001)$ 稀磁半导体薄膜的能量稳定性、磁性和电子结构** ..... 47  
李丹<sup>a\*</sup>, 李磊<sup>b</sup>, 梁春军<sup>a</sup>, 牛原<sup>a</sup> (a. 北京交通大学物理系, 北京 100044; b. 北京大学物理系, 北京 100871)

**摘要:** 通过基于广义梯度近似的总能量密度泛函理论研究不同Mn掺杂浓度的 $\text{ZnS}(001)$ 薄膜的电学和磁学特性. 计算单个Mn原子和两个Mn原子处于各种掺杂位置及不同的磁耦合状态时的能量稳定性. 计算了单个Mn原子掺杂和两个Mn原子掺杂的 $\text{ZnS}(001)$ 薄膜的态密度. 不同掺杂组态的p-d杂化的程度不同. 不同掺杂组态, Mn原子所处的晶场环境不同, 所以不同掺杂组态的Mn的3d分波态密度峰的劈裂有很大的不同. 掺杂两个Mn原子时, 得到三种稳定组态的基态都是反铁磁态. 分析了以上三种能量稳定的组态中, 两个Mn原子在不同磁耦合状态下的3d态密度图. 当两原子为铁磁耦合时, 由于d-d电子相互作用, 使反键态的态密度峰明显加宽. 随着Mn掺杂浓度的增加, Mn原子有相互靠近, 并围绕S原子形成团簇的趋势. 对于这样的组态, Mn原子之间为反铁磁耦合能量更低.

**关键词:**  $\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{S}(001)$  薄膜, 电子结构, 稀磁半导体

**苯酚苯胺共聚物在304不锈钢电极表面的电化合成及成膜微观结构分析** ..... 55  
鲍立垠, 熊蓉春, 张雯, 魏刚\* (北京化工大学材料科学与工程学院, 化工资源有效利用国家重点实验室, 北京 100029)

**摘要:** 苯酚和苯胺在304不锈钢阳极表面实现了电化共聚, 反应在中性水溶液中进行, 电解质为硫酸钠. 比较不同苯酚苯胺浓度下共聚成膜耐蚀能力, 当苯酚为0.09 mol/L和苯胺为0.01 mol/L时最佳. 红外光谱分析证实苯胺结构出现在苯酚苯胺的共聚物中, 且共聚物膜比聚苯酚膜含有更多支链. 利用苯酚苯胺共聚物膜在四氢呋喃中的部分溶解性, 使用扫描电子显微镜分析四氢呋喃清洗前后的成膜, 观察到网状聚苯胺结构. 将共聚物膜与聚苯酚膜微观结构进行推测和比较, 解释在电聚合反应中适量加入苯胺能提升成膜防腐能力原因.

**关键词:** 电聚合, 苯酚, 苯胺, 304不锈钢, 点蚀

**草酸铈颗粒微米层状颗粒的合成及其光学性能** ..... 65  
祝玮, 张悠金\*, 何红梅, 方智勇 (中国科学技术大学化学系, 合肥 230026)

**摘要:** 在室温条件下, 以柠檬酸钠为辅助剂, 通过简单沉淀法合成了草酸铈 $\text{Eu}_2(\text{C}_2\text{O}_4)_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ 微米层状颗粒. 应用X射线衍

射、X射线电子能谱、场发射扫描电子显微镜、光致发光光谱对 $\text{Eu}_2(\text{C}_2\text{O}_4)_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ 结构与性能进行了表征. 讨论了草酸铈微米层状颗粒可能的形成机理.

**关键词:** 层状, 草酸铈, 沉淀法, 光致发光

#### 甲烷氧化偶联/氧化镁催化剂和纳米催化剂 ..... 70

Ali Farsi<sup>a,b\*</sup>, Ali Moradi<sup>a</sup>, Sattar Ghader<sup>a</sup>, Vahid Shadravan<sup>a,b</sup> (a. 伊朗Shahid Bahona大学化学工程系, 克尔曼; b. 伊朗Shahid Bahona大学Young研究中心, 克尔曼)

**摘要:** 采用初湿浸渍和溶胶凝胶法分别制备了Li/MgO催化剂和Li/MgO纳米催化剂. 比较两种Li/MgO催化剂对于甲烷氧化偶联反应的催化性能. 采用X射线衍射、BET吸附和透射电镜进行了表征. 在973–1073 K和总压力为101 kPa下对催化剂进行了测试. 实验结果表明, Li/MgO纳米催化剂比普通催化剂对于甲烷氧化偶联反应表现为更高的甲烷转化率, 较高选择性和较高的主要产物(乙烷和乙烷)的产率.

**关键词:** 甲烷氧化偶联, 纳米催化剂, 溶胶凝胶法

#### 利用生物质合成气在钼基催化剂上制备混合醇 ..... 77

仇松柏, 黄伟伟, 徐勇, 刘璐, 李全新\* (中国科学技术大学化学物理系, 生物质洁净能源实验室, 合肥 230026)

**摘要:** 采用柠檬酸络合作剂的溶胶凝胶法制备了一系列的钼基催化剂, 并应用到从生物质气合成气有效合成低碳混合醇的实际过程中. 在钼基催化剂中,  $\text{Cu}_1\text{Co}_1\text{Fe}_1\text{Mo}_1\text{Zn}_{0.5-6}\%$ K催化剂具有相对较高的混合醇时空产率. 通过实验发现, 反应温度在340 °C以下时, 碳转化率随着反应温度的增加而不断上升, 总醇的选择性却逐渐下降. 在试验测试的条件内, 从生物质气合成气合成的混合醇最大产率为494.8 g/(kg<sub>cat</sub>·h), 其中C2<sup>+</sup>醇(C2–C6高碳醇)占总醇含量的80.4%. 在不同的钼基催化剂上合成的混合醇, 其醇分布除甲醇以外均符合Schulz-Flory方程. 在醇类产物中, C2以上的高级醇含量占总醇重量的百分比为70%–85%. 同时, 利用X射线衍射和BET等表征手段对钼基催化剂的形态和结构进行了表征. 从生物质合成气生产的洁净生物质燃料混合醇具有较高的辛烷值, 可以用作运输燃料或汽油的添加剂.

**关键词:** 生物质, 生物质合成气, 混合醇, 钼基催化剂

#### 滤纸模板法二氧化钛纸的制备及其光催化活性 ..... 85

张清爽, 李巧玲\*, 李建强, 白蕊 (中北大学理学院化学系, 太原 030051)

**摘要:** 以滤纸为模板成功制备了由微带组成的二氧化钛纸光催化材料, 利用红外光谱、热重量分析、X射线衍射、扫描电子显微镜对其进行了表征. 通过对甲基橙溶液在紫外光下的降解, 考察了制得样品的光催化性能. 结果表明: 锐钛矿/金红石比为10:1的二氧化钛纸具有最高的催化活性, 且滤纸纤维提高样品的结晶度和锐钛矿的相转化温度. 并讨论了对二氧化钛纸的形成机理.

**关键词:** 二氧化钛纸, 微带, 滤纸, 光催化, 类纸状

#### 多种金属/TiO<sub>2</sub>核壳纳米棒阵列的通用制备方法 ..... 91

祝巍, 王冠中\*, 洪勋, 沈小双 (中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室, 物理系, 合肥 230026)

**摘要:** 使用了一种具有较大通用性的方法制备了金属/二氧化钛(TiO<sub>2</sub>)核壳纳米结构. 采用电沉积方法在多孔氧化铝模板(AAO)孔洞中沉积壁厚均匀的TiO<sub>2</sub>纳米管, TiO<sub>2</sub>纳米管的壁厚可以通过沉积时间来控制, 而纳米管的直径和长度则由模板孔洞大小和模板厚度决定. 采用这种方法制备的TiO<sub>2</sub>纳米管顶端是开放的, 而底端连接在电沉积前溅射在AAO模板背面的金膜上. 这种TiO<sub>2</sub>纳米管阵列结构适合进行二次电沉积, 以它为模板将Pd、Cu、Fe等金属沉积到纳米管中形成核壳纳米棒结构. 这是一种可以用于制备多种金属/TiO<sub>2</sub>核壳纳米结构的通用方法, 采用这种方法制备的金属/TiO<sub>2</sub>核壳纳米棒结构具有填充率高和取向性好的特点, 而且它们的壁厚和长度可以通过分别改变两步电沉积的时间来控制.

**关键词:** 二氧化钛, 纳米管, 核壳结构, 电沉积, 模板

#### 沉淀方法及铈掺杂对铜锰氧化物催化剂催化氧化CO性能的影响 97

张学彬<sup>a</sup>, 马扩颜<sup>b</sup>, 张灵辉<sup>a</sup>, 雍国平<sup>a</sup>, 戴亚<sup>b</sup>, 刘少民<sup>a\*</sup> (a. 中国科学技术大学化学系, 合肥 230026; b. 中国烟草川渝工业公司技术中心, 成都 610017)

**摘要:** 研究了铈掺杂及沉淀方法对铜锰氧化物催化剂的结构特性及室温催化氧化CO性能的影响. 使用X射线衍射、N<sub>2</sub>吸附脱附、等离子体发射光谱、程序升温还原、紫外可见漫反射以及X射线光电子能谱等手段对各催化剂进行了表征. 发现掺杂少量的铈于铜锰氧化物催化剂中, CeO<sub>2</sub>相高度分散并能阻止催化剂的烧结和团聚, 所制得的催化剂的颗粒较小, 氧化还原性能提高, 比表面增大, 并形成了较多的活性位点, 使其对CO的催化氧化性能明显提高.

**关键词:** CO氧化, 铈掺杂的铜锰氧化物, 催化活性, 反向共沉淀

#### 纸质活性炭纤维的制备及性能表征 ..... 103

张宗见<sup>a</sup>, 李嘉<sup>a\*</sup>, 孙富升<sup>a</sup>, 吴恒亮<sup>b</sup>, 邝丰荣<sup>b</sup>, 刘世权<sup>a</sup> (a. 济南大学材料科学与工程学院, 济南 250022; b. 香港中文大学物理系, 香港)

**摘要:** 通过KOH活化纸中制备活性炭纤维, 比表面积高达1388 m<sup>2</sup>/g. 用制得的活性炭纤维作为吸附剂进行亚甲基蓝吸附实验研究, 用Langmuir和Freundlich吸附模型分析实验数据, 并研究pH值对活性炭纤维吸附亚甲基蓝影响. 活性炭纤维吸附速率更适于Pseudo-second-order动力学模型, 相关系数高达0.998. 整个浓度变化区间Langmuir吸附等温线比Freundlich吸附等温线更适合实验数据. 所制备活性炭纤维对亚甲基蓝最大平衡吸附量为520 mg/g, 实验发现, pH值越高活性炭纤维对亚甲基蓝吸附量越大.

**关键词:** 活性炭纤维, 纸巾, 微观结构, 吸附, 亚甲基蓝

#### 利用氧化辅助气固法生长高磁性的 $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ 和 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米线 ... 109

章明<sup>a,b\*</sup>, 许乃锋<sup>a,c</sup> (a. 中原大学机械工程系, 中坻 32023; b. 华中科技大学机械科学与工程学院, 武汉 430074; c. 陆军专科学校共同科, 中坻 32023)

**摘要:** 探讨生长 $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ 和 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米线的一个可控制的合成过程. 在研究中发现, 高磁性的 $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ 纳米线已经成功地利用氧化辅助气固法结晶生成于 $\text{Fe}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}$ 合金基板上; 若基板事先浸泡于草酸溶液中, 随草酸浓度的增加, 所生长的纳米线晶相会逐转变为 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ , 当草酸浓度达到0.75 mol/L时, 所生长的纳米线几乎全部转变成 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 晶相. 此外, 实验结果也显示所生长的纳米线长度及直径会随着气固过程中的温度上升而增加, 生长密度则会随着气固过程中的流量加大而上升. 此过程所提出的合成程序可在2 h内完成.

**关键词:** 氧化辅助气固法,  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米线,  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ 纳米线, 草酸, 磁性材料

#### 刚性衬底上铜铟硒纳米棒阵列的合成与表征 ..... 115

张中伟, 李纪, 刘纪磊, 朱长飞\* (中国科学技术大学材料科学与工程系, 中国科学院能量转换材料重点实验室, 合肥 230026)

**摘要:** 在覆盖有铎电极的硅衬底上利用多孔阳极氧化铝模板为生长掩膜电沉积合成垂直排列的铜铟硒纳米棒阵列. 多孔阳极氧化铝模板由阳极氧化磁控溅射制备的铝膜制成. 扫描电子显微镜结果表明, 该纳米棒阵列结构致密, 直径约100 nm长度约1  $\mu\text{m}$ , 纵横比为10. X射线衍射、微区拉曼光谱和高分辨透射电子显微镜结果表明, 真空条件下450 °C退火处理的铜铟硒纳米棒是多晶纯相的黄铜矿结构的铜铟硒, 在纳米棒轴向方向上有比较大的晶粒尺寸. 能量色散X射线光谱表明, 铜铟硒纳米棒的化学组成接近 $\text{InSe}_2$ 的化学计量比, 由吸收光谱分析推算铜铟硒纳米棒带隙为0.96 eV.

**关键词:** 铜铟硒纳米棒, 电沉积, 多孔氧化铝模板

#### 氧化苦参碱在0.9%NaCl溶液中溶解的热力学性质 ..... 121

李宗孝<sup>a\*</sup>, 蒲小华<sup>a</sup>, 赵微微<sup>b</sup>, 陈艳<sup>a</sup> (a. 宝鸡文理学院化学化工系, 宝鸡 721007; b. 西北农林科技大学理学院, 杨凌 712100)

**摘要:** 采用Calvet RD496-2000型微量量热计在常压及309.65 K条件下, 测得了氧化苦参碱在0.9%NaCl溶液中的溶解焓, 确定了其微分溶解热和积分溶解热, 阐明了其溶解过程的动力学方程, 并且获得其溶解过程的半衰期.

**关键词:** 氧化苦参碱, 热力学, 动力学, NaCl溶液