

Chinese Abstracts (中文摘要)

He₂分子b³Π_g(v=9)态的预解离 125
李传亮^a, 邓伦华^a, 张俊丽^a, 杨晓华^{a,b}, 陈扬晏^{a*} (a. 华东师范大学精密光谱科学与技术国家重点实验室, 物理系, 上海 200062; b. 南通大学理学院, 南通 226007)

摘要: 利用光外差-浓度调制吸收光谱技术测量了b³Π_g~a³Σ_u⁺(9, 3)带在12065~12445 cm⁻¹的光谱, 并研究了He₂分子b³Π_g(v=9)态与c³Σ_g⁺态的预解离相互作用. 基于He₂分子c³Σ_g⁺态的*ab initio*理论计算势能曲线和b³Π_g态的RKR势能曲线, 分析了b³Π_g(v=9)态的预解离机制, 并计算了b³Π_g(v=9)态转动能级的预解离线宽, 计算结果同实验测量基本一致.

关键词: He₂分子, 预解离, 浓度调制光谱

HOD分子在C¹B₁态的光解动力学: 产物OH/OD的分支比以及OD键解离能 129

程丽娜, 程元, 袁开军^{*}, 郭庆, 汪涛, 戴东旭, 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H(D)原子里德堡态时间飞渡谱技术研究了HOD超声射流分子束在124 nm附近的C¹态光解动力学. 实验测量了HOD分子在C¹态的转动分辨的吸收谱, 并得到了五个转动峰下H+OD以及D+OH通道的产物总的平动能谱. 通过对产物平动能谱的分析, 得到了C¹态解离产物OH和OD的分支比, 并与B¹态和A¹态相应解离产物的分支比做了对比. 实验结果确定了HOD分子OD键的解离能为41751.3±5 cm⁻¹.

关键词: 光解, 里德堡态, 分支比, 解离能

第一性原理研究LuAlO₃中掺杂Ce³⁺的4f-5d跃迁性质 134

方振兴, 宁利新^{*}, 崔执凤 (安徽师范大学物理系, 芜湖 241000)

摘要: 通过对基态4f电子采用杂化密度泛函理论方法、对5d激发态采用限制性布居方法, 研究了LuAlO₃:Ce³⁺体系4f-5d跃迁的相关性质. 结果表明, 伴随着4f到5d的跃迁, Ce³⁺与8个最近邻配位O原子的平均键长缩短了0.05 Å, 而且Stokes位移计算值与实验值相当吻合. 在优化计算得到的LuAlO₃:Ce³⁺体系4f基态局域构型基础上, 采用角重叠模型计算了5d能级的晶场分裂, 与实验结果吻合较好.

关键词: 第一性原理, 4f-5d跃迁, Ce³⁺, LuAlO₃晶体

线偏振周期量级脉冲中H⁻强场光解离的不对称性 141

白丽华^{*}, 刘宇恒, 崔婷婷, 王燕, 张惠芳 (上海大学物理系, 上海 200444)

摘要: 用数值求解含时薛定谔方程的方法研究了线偏振周期量级激光场中氢负离子光解离的不对称性. 通过计算随载波-包络(CE)相位变化的光电子不对称参数, 证实光电子分布的不对称性存在于氢负离子光解离过程中. 在相同条件下, 氢负离子最大不对称参数与氢原子的相等, 而与之相应的CE相位却不相同, 从而呈现出CE相位的移动. 通过比较氢原子和无外场电子发现这种相位的移动敏感受到库仑场的影响. 进一步计算了在这些特殊CE相位上的瞬时电离率直观地呈现出周期量级脉冲光解离的不对称性.

关键词: 不对称参数, 光解离, CE相位, 周期量级脉冲, H⁻

大气NO₃自由基损耗率和温度的关系 145

李素文^{a*}, 谢品华^b, 陈得宝^a, 姜恩华^a, 汪徐德^a (a. 淮北师范大学物理与电子信息学院, 淮北 235000; b. 中国科学院环境光学与技术重点实验室, 合肥 230031)

摘要: 利用差分吸收光谱系统得到了大气NO₃、NO₂和O₃的浓度, 基于NO₃损耗率和温度关系, 获得了一种判定NO₃对于VOCs的大气氧化能力和清除大气中NO_x能力的新指示剂, 该指示剂用动力学常量和单萜烯释放速率与温度关系来研究NO₃的损耗率. 新指示剂应用于研究合肥郊区外场观测的NO₃的氧化能力, 分析结果表明, 在观测期间单萜烯对于NO₃的损耗贡献约为70%~80%.

关键词: NO₃, 差分吸收光谱, 指示剂, 损耗率, 氧化能力

维生素C对菲醌三重激发态的淬灭机理及动力学研究 150

许新胜^{*}, 史蕾, 刘毅, 季学韩, 崔执凤 (安徽师范大学原子与分子物理研究所, 芜湖 241000)

摘要: 用时间分辨电子自旋共振技术研究了乙二醇(EG)均相溶液和反胶束溶液中抗氧化剂维生素C(VC)对菲醌(PAQ)分子激发三重态³PAQ*的淬灭反应. 利用反胶束模拟生物细胞和组织的生理环境. 光解PAQ/EG-H₂O均相溶液, ³PAQ*与溶剂分子EG之间发生氢转移反应. 当体系中加入VC后, ³PAQ*不仅从EG上夺氢, 还从VC上

夺氢, VC对³PAQ*的淬灭速率常数为1.409×10⁸ L/(mol s), 反应受扩散控制. 在CTAB/EG-H₂O和AOT/EG-H₂O反胶束溶液中, ³PAQ*和VC之间的夺氢反应发生在反胶束的水/油界面附近, ³PAQ*扩散到油/水界面的过程降低了反应的速率. 对于TX-100/EG-H₂O反胶束溶液, 由于PAQ增溶于亲水的聚氧乙烯链中, VC对³PAQ*的淬灭速率常数比CTAB/EG-H₂O和AOT/EG-H₂O反胶束中的都大, 甚至比EG-H₂O均相溶液中的也略大. 很强的VC负离子自由基As⁻的CIDEP信号来源于³PAQ*与VC之间发生抽氢反应过程中的三重态机理自旋极化转移.

关键词: 菲醌, 维生素C, 时间分辨电子自旋共振, 反胶束

MnSb/GaSb(001)界面半金属特性的第一性原理研究 155

Elmira Sartipi^{a*}, Alireza Hojabri^a, Arash Bouchani^b, Mohammad Homayon Shakib^a (a. 伊朗伊斯兰阿扎德大学卡拉杰分校物理系, 卡拉杰; b. 伊朗伊斯兰阿扎德大学克尔曼沙阿分校物理系, 克尔曼沙阿)

摘要: 利用密度泛函理论计算六角NiAs型和立方闪锌矿型MnSb的电子和电磁特性, 研究闪锌矿MnSb与GaSb(001)界面, 并采用广义渐变近似计算了交换-相关项. 闪锌矿结构的MnSb具有半金属铁磁性, 单分子磁矩4 μ_B, MnSb/GaSb(001)界面同样具有半金属特性. 界面中Mn原子的磁矩减小, 界面中Sb原子磁矩等于两个相应界面磁矩的平均值. 另外计算了能带排列在异质结中价带偏移大约1.25 eV.

关键词: 自旋电子, 表面, 界面, 密度泛函理论

介电限域效应对PbSe量子点禁带宽度计算的影响研究 162

程文超^{a,b}, 张铁强^b, 张宇^{a,b*} (a. 吉林大学电子科学与工程学院, 集成光子国家重点实验室, 长春 130012; b. 吉林大学物理学院, 超硬国家级重点实验室, 长春 130012)

摘要: 考虑了PbSe量子点介电限域效应对激子的影响, 引入了修正因子, 提出了一种新的量子点禁带宽度的计算模型. 与实验数据比较, 两者具有良好的一致性. 尤其是在小尺寸量子点的情况下, 修正后的模型与实验值表现出更好的一致性. 通过调整受限势垒的大小, 分析不同溶剂条件下PbSe禁带宽度的计算模型, 说明采用的修正模型对溶剂的变化是不敏感的, 与实验的结论是一致的.

关键词: 介电限域效应, 硒化铅, 禁带宽度

Ni²⁺掺杂到氟化物钙钛矿中的局域结构畸变和基态分裂的理论研究 167

曹喜民^a, 邝小渝^{a,b*}, 李成刚^a, 柴瑞鹏^a (a. 四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610064; b. 中国科学院国际材料物理中心, 沈阳 110016)

摘要: 基于双自旋轨道耦合系数模型并结合完全能量矩阵的方法, 研究了AMF₃(A=K, Rb; M=Zn, Cd, Ca):Ni²⁺和K₂ZnF₄:Ni²⁺体系中Ni²⁺的基态分裂和局域结构. 通过模拟光谱和电子顺磁共振(EPR)谱, 结果显示在研究氟化物络合分子的能级精细结构和局域结构畸变时, 配体F⁻对体系的自旋轨道耦合机理的影响不可忽略, 同时讨论了EPR参量随夹角、自选轨道耦合、平均参量以及偏离参量的变化规律.

关键词: 完全能量矩阵, 双自旋轨道耦合系数模型, 局域结构畸变

密度泛函研究细梗胡枝子提取物中新型抗氧化剂的分子结构和活性氧清除机理 173

李敏杰^{*}, 张良苗, 刘卫霞, 陆文聪 (上海大学理学院化学系, 上海 200444)

摘要: 采用密度泛函方法研究了从细梗胡枝子中提取的三种新型抗氧化剂的分子结构和活性氧清除机理. 研究发现优化后的最优分子构型中都含有分子内氢键, 与用二级微扰方法得到的结果一致. 根据预测的气相和水相抗氧化剂的键解离能、电离势, 以及三种重要活性氧的电子亲和势和氢原子亲和势, 详细讨论了三种抗氧化剂的活性氧清除机理并发现其抗氧化活性和实验结果一致.

关键词: 密度泛函理论, 分子结构, 活性氧清除机理, 新型抗氧化剂

尺寸和微结构效应对软锰矿红外光谱的影响 181

蔡若愚^a, 王文楼^{a*}, 姜恒^a, 石磊^a, 贺博, 韦世强^b (a. 中国科学技术大学化学物理系, 合肥 230026; b. 中国科学技术大学同步辐射国家实验室, 合肥 230026)

摘要: 合成了纳米纤维状的软锰矿β-MnO₂, 其研磨后粒子形貌由纳米纤维转变为纳米粒子, 相结构并没有转变. 纳米纤维状粒子中心锰离子局域环境有轻微改变. 当粒子形貌从长纳米纤维变到短纳米纤维再到纳米粒子时, 傅里叶转换红外光谱A_{2u}频率逐渐

从514 cm^{-1} 到574 cm^{-1} 再到617 cm^{-1} . 研究发现依据功能团分析无法确定额外的振动波段来源于不同尺寸和形状粒子的 A_{2u} . 通过X射线衍射的Rietveld精修和红外光谱, 认为两种 MnO_6 的八面体构型, 如4长+2短, 4短+2长, 在由不同路线合成的软锰矿中都会存在. 微结构对软锰矿傅里叶转换红外光谱最大振动频率的影响是显著的. 在红外和远红外区域的四个振动波段都做了分类.

关键词: $\beta\text{-MnO}_2$, 傅里叶红外, 微结构

分子基磁体 $\text{Cr}[\text{N}(\text{CN})_2]_2$ 电子结构和半金属性的第一性原理研究

189
黄海铭^{a*}, 罗时军^a, 刘国营^a, 姚凯伦^{b,c} (a. 湖北汽车工业学院理学院, 十堰 442002; b. 华中科技大学物理学院, 武汉 430074; c. 中国科学院国际材料物理中心, 沈阳 110016)

摘要: 基于第一性原理方法结合广义梯度近似, 研究了分子基磁体 $\text{Cr}[\text{N}(\text{CN})_2]_2$ 的电子结构和半金属性. 对总能量, 自旋极化的能带结构, 态密度以及自旋磁矩的计算表明该分子磁体为半金属铁磁体. 每个分子的总磁矩为 $2.00\mu_B$, 其中 Cr^{2+} 对分子磁矩的贡献较大, 而配位体上的碳原子和氮原子的贡献相对较小. 讨论了当晶格常数发生小幅变化时材料半金属性的变化.

关键词: 第一性原理, 磁性, 半金属性

噻吩低聚物分子器件电输运特性的理论研究

194
李宗良 (山东师范大学物理与电子科学学院, 济南 250022)

摘要: 利用从头计算方法和弹性散射格林函数理论, 对不同噻吩低聚物分子的电输运性质进行理论研究. 结果显示, 由于分子几何结构对称性的不同使得末端基团跟金电极的连接方式不同, 导致了分子与电极间耦合常数以及分子轨道的扩展性不同. 出现了同系列的噻吩低聚物分子中较长的分子比较短分子导电性更好的反常现象.

关键词: 分子器件, 电输运性质, 噻吩低聚物

RDX/AMMO推进剂的分子动力学

199
李苗苗^{*}, 沈瑞琪, 李凤生 (南京理工大学化工学院, 南京 210094)

摘要: 利用分子动力学方法研究了含能材料环三亚甲基三硝胺(RDX)、3-叠氮甲基-3-甲基氧丁环(AMMO)和RDX/AMMO推进剂. 结果表明AMMO与RDX(010)面分子之间相互作用最强, 其次是(100)和(001)面. 用相关函数 $g(r)$ 描述了RDX和AMMO之间的相互作用. 计算了RDX/AMMO推进剂的弹性系数、柯西压、泊松比等性能. 研究结果表明, AMMO的加入能够改善RDX的弹性力学性能, 它们的相对改善效应为(100)>(010)>(001). RDX/AMMO推进剂的能量性能显示, AMMO的加入降低了RDX的比冲, 但其仍高于双基推进剂.

关键词: 环三亚甲基三硝胺, 3-叠氮甲基-3-甲基氧丁环, 分子动力学, 力学性能, 结合能

模板法合成多壁碳纳米管复合材料

206
李文博^a, 翟东媛^a, 潘力佳^{a*}, 濮林^a, 许建斌^b, 施毅^{a*} (a. 南京微结构国家实验室, 江苏省光电信息功能材料重点实验室, 南京大学电子科学与工程学院, 南京 210093; b. 香港大学电子工程系, 材料科学与技术研究中心, 香港)

摘要: 以包覆在碳纳米管表面的薄层二氧化锰作为表面再包覆聚苯胺的反应性模板合成了聚苯胺和碳的复合的多壁碳纳米管结构, 该复合材料在水中显示出很好的分散性. 该方法还可以用来合成如聚3,4-乙撑二氧噻吩、聚吡咯、二氧化硅、无定形碳等材料与碳纳米管的复合材料.

关键词: 高分子聚合物, 纳米结构, 电化学性能

在Ni/HZSM-5催化剂上低温水蒸汽重整生物油制氢

211
仇松柏^a, 宫璐, 刘璐, 洪成贵, 袁丽霞, 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: 利用浸渍法制备的Ni/HZSM-5催化剂在生物油低温水蒸汽重整合成中表现了较高的催化活性. 探讨了催化剂的组成、重整温度、水碳比例对重整过程的影响. 在电催化重整研究中, 发现催化剂上通过的电流可以显著地促进生物油水蒸汽重整. 通过对不同负载量的Ni/HZSM-5催化剂和 $\text{Ni}_{20}/\text{Al}_2\text{O}_3$ 催化剂的催化活性的比较, NiO在催化剂中负载量为20%($\text{Ni}_{20}/\text{ZSM}$)时表现出了最高的催化活性; 即使在450 $^{\circ}\text{C}$ 时, 在 $\text{Ni}_{20}/\text{ZSM}$ 催化剂上也可以达到碳转化率接近完全, 氢气产率约为90%的效果. 利用XRD、ICP/AES、 H_2 -TPR、BET等表征手段对Ni/HZSM-5催化剂的形态和结构进行了表征.

关键词: 生物油, 氢气, 水蒸汽重整, Ni/HZSM-5催化剂

CHCl_3 电子吸附速率常数的离子迁移谱

218
韩海燕^{a,b*}, 冯鸿涛^a, 李虎^a, 王鸿梅^a, 江海河^a, 储焰南^a (a. 中国科学院安徽光学精密机械研究所环境光谱实验室, 合肥 230031; b. 河北工程大学理学院, 邯郸 060530)

摘要: 利用电晕放电离子迁移谱, 使用高纯氮气作为载气和迁移气体, 研究了电场强度在200~500 V/cm 变化时 CHCl_3 的解离电子吸附速率常数, 得到样品所对应的电子吸附速率常数为 $1.26 \times 10^{-8} \sim 8.24 \times 10^{-9} \text{ cm}^3/(\text{molecules s})$. 利用该装置测量了固定电场下, 样品的电子吸附速率常数与样品浓度之间的关系. 此外利用所获得的离子迁移谱图得到了不同电场强度下 Cl^- 与 CHCl_3 之间的离子分子反应速率常数.

关键词: 离子迁移谱, 解离电子吸附, 离子分子反应, 三氯甲烷

电沉积-退火工艺制备铜硒太阳能电池薄膜及表征

225
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: 利用电沉积硒气氛下后续退火的工艺制备出了高结晶质量的铜硒薄膜. 通过X射线衍射、扫描电子显微镜、拉曼光谱、紫外-可见-近红外光谱和阻抗谱技术对退火后的铜硒薄膜进行表征, 结果表明530 $^{\circ}\text{C}$ 硒化退火后的铜硒薄膜具有四方的黄铜矿晶体结构, 晶粒尺寸达到微米量级, 光学带隙为0.98 eV, 经过KCN溶液去除表面高导电性的铜硒化合物后铜硒薄膜的载流子浓度在 10^{16} cm^{-3} 量级. 利用硒化退火的铜硒薄膜作为光吸收层制备了结构为AZO/i-ZnO/CdS/CIS/Mo/glass的太阳能电池, 在AM1.5光照条件下对其电流-电压特性测试后发现面积为 0.2 cm^2 的电池可以达到0.96%的能量转换效率, 并对限制电池效率的原因做出了初步的分析和讨论.

关键词: 铜硒薄膜, 电沉积, 退火, 太阳能电池

氢、碳氢燃料对向扩散火焰

231
汪小卫^a, 蔡国飙^{a*}, Vigor Yang^b (a. 北京航空航天大学宇航学院, 北京 100191; b. 美国佐治亚理工学院航空航天系, 佐治亚州 30332)

摘要: 对氢、正烷烃碳氢燃料与氧的对向扩散火焰, 其中正烷烃包含了在工业用燃料中广泛应用的 $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$ 正烷烃 $\text{CH}_4 \sim \text{C}_{16}\text{H}_{34}$, 对这些燃料的火焰结构进行了分析和比较, 系统地分析了压力和拉伸率对火焰行为和热释放率等的影响, 其中包含了2115个组分8157个可逆反应. 研究结果表明, 所有燃料的火焰厚度和热释放率与压力和拉伸率的乘积的平方根成线性关系. 在相同工况下, 氢的火焰厚度总是大于所有的碳氢燃料, 而 $\text{CH}_4 \sim \text{C}_{16}\text{H}_{34}$ 所有的碳氢燃料在相同工况下总是具有几乎相同的燃烧温度分布、燃烧产物分布、火焰厚度和热释放率, 该结果表明由这些碳氢燃料组成的混合燃料具有同样的火焰特性.

关键词: 对向扩散火焰, 燃烧, 氢, 碳氢燃料, 火焰

基于偶氮酮基席夫碱新型简单比色传感器

239
刘阔^{a*}, 邵杰^b (a. 赤峰学院化学系, 赤峰 024000; b. 南京林业大学化学与材料科学系, 南京 210037)

摘要: 通过简单的步骤合成了一个新型的N-(2-羟基-5-氯二苯酮基)-N'-[2-羟基-5-偶氮苯基-苯甲酰]-1,2-二胺受体, 并有很高的产率. 利用紫外光谱研究了受体的阴离子识别的性质. 结果表明受体对 F^- 、 AcO^- 和 H_2PO_4^- 有很高的结合能力, 而对 Cl^- 、 Br^- 和 I^- 没有结合能力. 在受体的二甲亚砜溶液中加入三种有结合能力的阴离子时, 溶液展示了从无色到黄色的明显颜色变化, 可以通过肉眼识别. 在其它卤素离子存在下受体可以担当氟离子的传感器. 紫外数据证明受体与阴离子通过氢键的相互作用形成1:1化学计量比的复合物.

关键词: 席夫碱, 合成, 超分子化学, 氢键, 紫外滴定

由苯经水促高选择性阳极乙酰氧化法一步合成乙酸苯酯

244
裴娟, 秦松, 李桂英, 胡常伟^{*} (四川大学化学学院绿色化学与技术教育部重点实验室, 成都 610064)

摘要: 采用恒电流方法, 电解苯和乙酸一步合成乙酸苯酯, 研究了水对反应效率的影响. 和无水体系相比, 加入水提高了反应的电流效率和乙酸苯酯的选择性. 在优化得到的最佳反应条件下, 反应的电流效率和产物的选择性分别可达4.8%和96%. 乙酸苯酯的浓度随着时间的延长呈线性增加的趋势, 反应12 h后乙酸苯酯的浓度达1.07 g/L , 选择性保持在95%以上. 反应机理的研究表明, 该反应可能涉及吸附活化苯的机理, 主要副反应是Kolbe反应. 水的加入促进了苯在铂片电极表面的吸附, 从而提高了反应的效率和乙酸苯酯的选择性.

关键词: 阳极乙酰氧化法, 苯, 乙酸水溶液, 乙酸苯酯, 机理