

## Chinese Abstracts

## 本期中文摘

异补骨脂素热解实验和理论研究..... 249  
杨政重<sup>a</sup>, 张凤<sup>a</sup>, 贾良元<sup>a</sup>, 张李东<sup>a\*</sup>, 齐飞<sup>a</sup>, 樊海燕<sup>b</sup>, 蔡继宝<sup>b\*</sup>  
(a. 中国科学技术大学国家同步辐射实验室, 合肥 230029; b. 江西中烟工业有限责任公司, 南昌 330096)

**摘要:** 利用同步辐射真空紫外光电质谱技术, 在不同光子能量下, 研究了异补骨脂素( $C_{11}H_6O_3$ )的低压热解, 探测了不同温度下异补骨脂素的热解产物及其与前驱体的比例. 实验结果表明, 异补骨脂素的主要热解产物是CO及其依次消去CO的产物( $C_{10}H_6O_2$ 和 $C_9H_6O$ ). 利用密度泛函理论计算异补骨脂素的解离途径, 并利用过渡态理论计算了竞争通道的反应速率常数. 通过实验和理论相结合, 确定了异补骨脂素主要解离途径和相应产物的分子结构.

**关键词:** 异补骨脂素, 热解, 同步辐射真空紫外光电质谱, 密度泛函, 过渡态理论

氢键效应对2,3-二氢-3-酮基-1H-吡啶并[3,2,1-k]吩噻嗪光物理性质的影响..... 254

羊送球<sup>a,b\*</sup>, 何国钟<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 100039)

**摘要:** 利用含时密度泛函理论(TDDFT)方法和飞秒时间分辨的瞬态吸收光谱技术对2,3-二氢-3-酮基-1H-吡啶并[3,2,1-k]吩噻嗪(PTZ4)和3-酮基-1H-吡啶并[3,2,1-k]吩噻嗪(PTZ5)这两种荧光探针分子的光物理性质进行了研究. TDDFT结果表明PTZ4和PTZ5在甲醇溶液形成了氢键络合物导致它们吸收峰的红移. PTZ4分子在基态有四种稳定构型, 其在四氢呋喃溶液中的双荧光峰正是来自于四种构型下的内部电荷转移态. PTZ4分子在四氢呋喃和甲醇溶液中的瞬态吸收光谱表明, 从局域态到转移态的弛豫时间常数在四氢呋喃中为16.0 ps, 在甲醇中为7.5 ps; PTZ4分子在甲醇中的激发态寿命为53.8 ps, 而这种超短的寿命可能是由于PTZ4分子在激发态时形成的面外型氢键络合物导致的.

**关键词:** 荧光探针, 飞秒时间分辨, 瞬态吸收, 氢键, 荧光猝灭

锂掺杂氧化锌复合缺陷结构的杂化密度泛函研究..... 261

孙旭, 顾有松<sup>\*</sup>, 王学强, 张跃 (北京科技大学材料科学与工程学院材料物理系, 北京 100083)

**摘要:** 利用第一原理计算以及杂化密度泛函方法研究了锂掺杂氧化锌的各种缺陷态的电子结构, 并通过缺陷形成能考察其在不同气氛中的能量稳定性. 计算结果表明, 在通常的气氛条件下, 锂离子占据间隙位置和锂离子替换锌离子形成的复合缺陷具有最低的形成能. 锂掺杂氧化锌中, 复合缺陷的形成使氧化锌很难实现p型导电. 然而, 当气氛从富锌环境转变到极端氧环境时, 锂替代锌离子的缺陷将更加稳定, 其形成能将低于锂间隙和锂替代锌复合缺陷的形成能. 因此, 锂掺杂氧化锌可以通过在氧气氛中生长, 或在富含氧气氛中退火得到有效的p型导电.

**关键词:** 锂掺杂氧化锌, 复合缺陷, 杂化密度泛函

振动波包模拟氢溴酸光解离动力学..... 269

Chandan Kumar Mondal<sup>\*</sup>, Bikram Nath (印度Jadavpur大学物理化学部化学系, 加尔各答-700032)

**摘要:** 研究了在零度和非零度时的双原子分子离子HBr<sup>+</sup>在不同包络函数的超快激光脉冲作用下的光解离动力学. 主要计算了HBr<sup>+</sup>电子基态时的参数. 利用从头算理论在CCSD/6-311++G(3df, 2pd)水平计算了HBr<sup>+</sup>的势能值, 用Morse参数模拟后, 与非依时傅立叶格点哈密顿方法获得的束缚态振动能量本征值进行比较. 另外, 探索了温度、脉冲包络函数和光强度对光解离过程的影响.

**关键词:** 光解离, 温度效应, 傅立叶格点哈密顿方法, 脉冲包络函数, 双色场

相互作用势对激光辅助电子-氩原子散射的影响..... 277

王晓飞<sup>a\*</sup>, 胡秋波<sup>b</sup>, 孙金锋<sup>c</sup> (a. 河南科技大学物理与工程学院, 洛阳 471003; b. 洛阳理工学院数理部, 洛阳 471023; c. 洛阳师范学院物理与电子信息学院, 洛阳 471022)

**摘要:** 在三种势模型下运用二级玻恩近似理论计算了电子与氩原子散射的微分散射截面. 结果显示这些势模型在激光辅助电子-氩原子散射系统中的运用非常成功. 另外, 分析和讨论了静电势、交换势和极化势对散射截面的影响.

**关键词:** 极化势, 交换势, 微分散射截面, 激光场

质子化corroles的结构和电子光谱的密度泛函理论研究..... 281

高慧玲, 姚国华, 陈方, 王文楼, 陈东明<sup>\*</sup> (中国科学技术大学化学物理系, 合肥市 230026)

**摘要:** 用电子密度泛函理论研究了N-质子化corrole( $H_4Cor^+$ )和meso位芳基取代质子化corroles( $H_4TPC^+$ 、 $H_4TpFPC^+$ 和 $H_4TdCPC^+$ )的几何构型、内消旋反应机理以及电子光谱. 结果表明, 这些化合物均有两种稳定构型(势能面极小), 一个为 $C_2$ 对称性的S1(最稳定构型), 另一为 $C_1$ 对称性的S2, 其中S1的能量比S2低约15.8~18.5 kJ/mol. S1和S2的corrole环都呈现明显的面外扭曲变形. 手性S1的两个对映异构体之间的转化是一个以S2为中间态的多步过程. 用TDDFT计算了它们的紫外可见电子吸收光谱和圆二色谱(ECD). 与 $H_4Cor^+$ 相比,  $H_4TPC^+$ 、 $H_4TpFPC^+$ 和 $H_4TdCPC^+$ 的紫外可见吸收都发生了明显红移, 且它们的Q带都因芳基取代基与corrole环之间的 $\pi-\pi$ 共轭而明显增强. 计算表明, 质子化corrole的若干相邻电子跃迁的旋转强度符号相反, 表明ECD谱可能是研究其电子跃迁的有用工具.

**关键词:** Corrole, N-质子化, 密度泛函理论, 消旋反应, 电子光谱

利用新构建势能面<sup>3</sup>A研究S(<sup>3</sup>P)+H<sub>2</sub>→HS+H反应含时波包量子散射..... 291

吕双江, 张佩宇<sup>\*</sup>, 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:** 利用高精度从头算能量点构建三重态<sup>3</sup>A'势能面. 单点能计算采用的方法是完全活性空间自洽场和多组态相互作用, 计算中所用的基组是aug-cc-pV5Z, 并利用多体展开方法结合AP函数形式对所有能量点进行了拟合. 在新构建的势能面基础上, 在平动能0.8~2.2 eV进行了含时波包散射计算, 计算中同时采用了离心突然近似和紧耦合方法. 另外还对初始振动态 $\nu=0\sim 3(j=0)$ 情况下的总反应几率进行了计算, 结果发现初始振动激发对该体系有很大的增强作用.

**关键词:** 势能面, 量子散射, 含时波包

吡啶并咪啉类Wee1激酶衍生物的三维定量构效关系与分子对接..... 297

曾国华<sup>a</sup>, 吴文娟<sup>a\*</sup>, 张荣<sup>a</sup>, 孙俊<sup>a</sup>, 谢文国<sup>a</sup>, 沈勇<sup>b</sup> (a. 广东药学院物理化学教研室, 广州 510006; b. 中山大学化学与化学工程学院, 广州 510275)

**摘要:** 采用比较分子场分析方法(CoMFA)和比较分子相似性指数分析方法(CoMSIA)对一系列吡啶并咪啉类衍生物进行了三维定量构效关系(3D-QSAR)研究, 建立了CoMFA和CoMSIA两种模型. 所构建的最佳模型的交叉验证相关系数分别为0.707和0.645, 非交叉验证系数分别是0.964和0.972, 模型的一些外部验证表明两个模型合理、可靠, 并具有良好的预报能力. 同时, 用分子对接的方法分析了该类化合物与Wee1激酶结构的作用模式, 结果进一步表明, 在R1和R5取代基上引入正电性基团, R2为体积小、电负性基团, 同时选择体积中等和强的推电子的R3但亲水性的X取代基, 能有效改善这类化合物的抑制活性.

**关键词:** Wee1蛋白激酶, 吡啶并咪啉类衍生物, 三维定量构效关系, 分子对接

受限高分子链穿越纳米管道的计算机模拟..... 308

周自斌<sup>a</sup>, 李化玉<sup>b</sup>, 谢永军<sup>b\*</sup> (a. 安徽经济管理干部学院信息科学系, 合肥 230059; b. 中国科学技术大学化学与材料科学学院, 合肥 230026)

**摘要:** 采用计算机模拟研究了受限空间的高分子链穿越纳米管道的行为. 研究结果表明, 对于不同的管道-高分子链相互作用的管道, 高分子链成功穿越管道所需的平均时间随着链长或管道长度的增加线性增大. 然而, 管道-高分子链之间较强的排斥和吸附作用会分别增加高分子链单元进入或离开管道的难度, 因此高分子链的平均穿越时间随着管道-高分子链相互作用的增大非单调变化. 同时进一步研究高分子链在穿越纳米管道时的动力学过程, 分析了管道-高分子链相互作用对高分子链穿越的影响.

**关键词:** 计算机模拟, 高分子链穿越, 管道-高分子相互作用, 穿越时间

室温下Ga<sub>1-x</sub>Ho<sub>x</sub>N(x=0.0和0.05)稀磁半导体薄膜磁性..... 313

Ghulam Murtaza Rai<sup>a\*</sup>, Muhammad Azhar Iqbal<sup>a</sup>, Yongbing Xu<sup>b</sup>, Iain Gordon Will<sup>b</sup>, Qasim Mahmood<sup>a</sup> (a. 巴基斯坦旁遮普大学物理系, 拉合尔 54590; b. 英国约克大学, 电子系自旋电子学

实验室, 约克 YO105DD)

**摘要:** 采用热蒸镀技术和后续氨退火制备了Ho掺杂GaN稀磁半导体薄膜. X射线衍射分析表明, 所有的峰属于六角纤锌矿结构. 利用扫描电子显微镜和能量色散谱分别进行了表面形貌和成分分析. 用振动样品磁强计在室温测定了 $Ga_{1-x}Ho_xN$ ( $x=0.0, 0.05$ )的室温铁磁性. 磁性测量结果表明, 未掺杂薄膜GaN具有抗磁性行为, 而Ho掺杂 $Ga_{0.95}Ho_{0.05}N$ 的薄膜表现出铁磁行为.

**关键词:** 稀磁半导体, 钬掺杂, X射线衍射仪, 扫描电子显微镜, 室温铁磁性

**沉降对带电胶体粒子结晶过程的影响** ..... 318

杜媛<sup>a,b</sup>, 徐升华<sup>a,b</sup>, 孙祉伟<sup>a,b,\*</sup>, 刘蕾<sup>a,b</sup> (a. 中国科学院力学研究所微重力重点实验室, 北京 100190; b. 中国科学院力学研究所国家微重力实验室, 北京 100190)

**摘要:** 采用密度匹配法(重水与水按一定比例混合), 以及反射光谱法, 研究了重力沉降作用对直径为98 nm的带电胶体粒子结晶过程的影响. 结果表明, 重力沉降在晶体生长的初期提高了晶体生长速率, 而后期降低了晶体生长速率, 这是由于在晶体生长初期, 沉降作用可使更多的粒子结合到晶体结构中, 而当晶体尺寸进一步增加, 其沉降速率也相应地增大, 晶相与液相间的摩擦阻力导致一部分颗粒从胶体晶体上脱落. 总的来说, 重力沉降在初期加剧了晶体的生长, 后期阻碍了晶体的生长. 另外, 在微重力环境下形成的胶体晶体比在重力环境下形成的胶体晶体更加完整紧密.

**关键词:** 胶体晶体, 密度匹配, 沉降, 反射光谱

**利用尿素热退火方法制备氮掺杂石墨烯** ..... 325

李新静<sup>a</sup>, 于欣欣<sup>b</sup>, 刘金养<sup>a</sup>, 范晓东<sup>a</sup>, 张琨<sup>b</sup>, 蔡洪冰<sup>b</sup>, 潘楠<sup>a</sup>, 王晓平<sup>a,b,\*</sup> (a. 中国科学技术大学物理系, 合肥 230026; b. 中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室(筹), 合肥 230026)

**摘要:** 在尿素气氛中, 通过热退火实验实现石墨烯的氮掺杂. 结合光电子能谱和拉曼光谱, 确定了氮在石墨烯中的掺杂构型, 并发现掺杂量可以通过退火温度和时间加以调控. 电性测量表明掺杂石墨烯的电导同氮掺杂量有很好的关联性.

**关键词:** 石墨烯, 掺杂, 电导, 光电子能谱, 拉曼光谱

**新型水填充多孔污损可脱附型防污涂层** ..... 330

解来勇<sup>a,b,\*</sup>, 洪飞<sup>a,b</sup>, 何传新<sup>b,\*</sup>, 刘剑洪<sup>b</sup>, 吴奇<sup>a,c</sup> (a. 中国科学技术大学化学物理系, 合肥 230026; b. 深圳大学化学化工学院, 深圳 518060; c. 香港中文大学化学系, 香港)

**摘要:** 在球磨机作用下, 氯化钠被碾磨成微米粒子, 使用分散剂, 将其均匀分散在有机硅树脂之中. 此混合物中添加交联剂, 涂膜并加热交联后得到氯化钠粒子均匀包裹其中的有机硅弹性体涂层. 此涂层在水中浸泡后, 氯化钠粒子会逐渐扩散进入水中, 而水逐渐填充原本由氯化钠粒子占有的孔洞, 从而形成水填充的多孔弹性体涂层. 扫描电镜图像证明了此结构的产生. 弹性体中存在的微米大小的水滴可以降低材料的剪切储能模量和增加损耗正切角. 其中剪切储能模量的降低起到了主要作用, 并使材料具有更好的污损可脱附性能. 同时使用廉价的氯化钠也可以有效降低材料整体的价格.

**关键词:** 海洋生物污损, 污损可脱附, 多孔有机硅弹性体, 模拟藤壶附着, 可溶盐

**氢化石墨烯作为不含金属的催化剂用于催化类Fenton反应** ..... 335

赵毅, 陈武峰, 袁成飞, 朱志业, 闫立峰\* (中国科学技术大学化学物理系, 合肥微尺度物质科学国家实验室(筹), 合肥 230026)

**摘要:** 采用室温辐照还原与氢化的方法制备氢化石墨烯. 透射电子显微镜、元素分析、X射线光电子能谱和紫外可见光谱等测试证实了获得的产物为氢化石墨烯. 以该氢化石墨烯为不含金属的催化剂进行了类Fenton反应, 发现其有高的催化活性, 可以用于水中有机物的氧化降解.

**关键词:** 石墨烯, 氢化, 无金属, 催化

**三维多孔花状ZnO微纳结构的合成及光催化性能** ..... 339

杨金玲, 费广涛\*, 李惠, 欧阳浩淼 (中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所, 中国科学院材料物理重点实验室, 安徽省纳米材料与纳米技术重点实验室, 合肥 230031)

**摘要:** 采用电沉积及后续的热处理技术, 在Ti衬底上合成了一种三维多孔花状ZnO微纳结构薄膜. 这种ZnO结构是由包含大量纳米颗粒和孔洞的纳米薄片组成, 纳米颗粒的大小可以通过调节电沉积时间和煅烧温度控制. 光催化性能的测试表明这种多孔ZnO薄膜是一种理想的光催化剂.

**关键词:** 多孔ZnO薄膜, 光催化剂, 微纳结构, 电沉积

**Ba/Fe-堇青石固溶体( $Ba_{0.05}Fe_{0.1}Mg$ ) $_2Al_4Si_5O_{18}$ 的组合筛选及红外辐射性能优化** ..... 345

唐馥涵<sup>a,b</sup>, 庄建东<sup>a</sup>, 费凡<sup>a</sup>, 刘茜<sup>a,\*</sup> (a. 中国科学院上海硅酸盐研究所高性能陶瓷和超微结构国家重点实验室, 上海 200050; b. 中国科学院研究生院, 北京 100049)

**摘要:** 采用组合材料方法制备并筛选了具有高红外辐射性能的Ba/Fe共掺杂堇青石固溶体( $Ba_{0.05}Fe_{0.1}Mg$ ) $_2Al_4Si_5O_{18}$ . 通过组合溶液喷射法, 制备了7×7阵列的样品库, 并在不同温度下进行热处理. 通过X射线衍射、红外热成像等测试方法分析了Ba<sup>2+</sup>、Fe<sup>3+</sup>固溶对堇青石晶格畸变和红外辐射性能的影响. 经过放大制备实验的验证, 确定了材料的最佳组分为5%Ba<sup>2+</sup>和10%Fe<sup>3+</sup>共固溶的堇青石. 最佳组分样品在100 °C时的红外辐射率在5–24 μm波段均高于0.8.

**关键词:** 堇青石, 固溶, 组合溶液喷射, 红外辐射率

**聚乙二醇-b-聚(4-乙烯基吡啶)/氢氧化钪杂化纳米管在金纳米粒子**

**负载方面的应用** ..... 352

杨倩, 陈道勇\* (复旦大学高分子科学系, 聚合物分子工程国家重点实验室)

**摘要:** 利用聚乙二醇-b-聚(4-乙烯基吡啶)(PEO-b-P4VP)胶束在氢氧化钪纳米管(YNTs)表面上的吸附, 制备出被致密的P4VP内层和伸展的PEO外层包裹的杂化纳米管. 通过小分子交联剂1,4-二溴丁烷交联P4VP层可进一步稳定其结构. 然后将交联的杂化纳米管(CHNTs)作为金纳米粒子(GNPs)催化剂的新型纳米载体. 金纳米粒子被负载在交联杂化纳米管的P4VP层中(GNPs/CHNTs), 并应用于催化对硝基苯酚的还原反应. 结果表明, 这种新型的纳米载体在水溶液中具有良好的分散性, 对金纳米粒子有很高的负载效率(0.87 mmol/g), 负载的金纳米粒子保持了很高的催化活性(12.9 μmol<sup>-1</sup>min<sup>-1</sup>), 且GNPs/CHNTs有较好的可重复使用性.

**关键词:** 金纳米粒子催化剂, 嵌段共聚物, 杂化纳米管, 对硝基苯酚, 重复使用

**三氯六氨络合钴导致DNA凝聚的分子梳研究** ..... 359

胡高铭, 林瑜, 冉诗勇, 王艳伟, 杨光参\* (温州大学物理与电子信息工程学院, 温州 325035)

**摘要:** 利用分子梳技术和动态光散射研究了三氯六氨络合钴和DNA分子之间的相互作用. 从荧光显微镜中可直接观察到经YOYO-1染色后λ-DNA分子的平均伸直长度比未染色的DNA分子增长约30%. 这是由于荧光染料YOYO-1分子插入双链DNA的碱基对中从而使DNA分子的长度增加. 另外研究了染色后的DNA-[Co(NH<sub>3</sub>)<sub>6</sub>]<sup>3+</sup>混合物的伸直长度随三氯六氨络合钴浓度的变化关系, 实验结果表明当钴离子浓度从0增加到3 μmol/L, 其混合物的伸直长度由原来的20.9 μm减小到5.9 μm. 利用动态光散射技术证实了这个结果, 发现在相同的实验条件下加入钴离子前后DNA-Co(NH<sub>3</sub>)<sub>6</sub><sup>3+</sup>混合物的流体学半径从203.8 nm减小到39.26 nm.

**关键词:** 分子梳, 三氯六氨络合钴, 凝聚, 动态光散射, 荧光显微镜

**用NiCuZnAl催化剂最大化生物油自热水蒸汽重整制氢** ..... 365

颜世志, 翟起, 李全新\* (中国科学技术大学化学物理系生物质净能源实验室, 合肥 230026)

**摘要:** 在较低的温度下, 通过将放热的部分氧化反应和吸热的水蒸汽重整反应耦合起来的自热方式实现了高效的制氢过程. 在氧碳比(O/C)为0.34, 水碳比(S/C)为3, 温度为600 °C时生物油接近完全转化, 得到最高氢产率为64.3%. 自热水蒸汽重整反应条件温度、O/C、S/C、质量空速等可以用来控制反应氢产率和气体产物分布. 对自热过程和普通水蒸汽重整过程做了比较, 并对反应机理进行了探讨.

**关键词:** 氢气, 生物油, 自热水蒸汽重整, NiCuZnAl催化剂