

Chinese Abstracts (中文摘要)

- 氯化镍在12900~15000 cm⁻¹的激光诱导荧光光谱** 631
秦成兵, 臧建正, 张群*, 陈旸* (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: 采用激光诱导荧光技术在12900-15000 cm⁻¹能量范围内研究了超声射流冷却条件下的氯化镍光谱. 通过分析, 6个具有转动结构的振转带被归属为跃迁序列. 相关的转动常数、同位素位移以及(平衡)分子常数被确定. 此外, 还测量了这些振转带的寿命.
关键词: NiCl, 激光诱导荧光, 同位素效应
- 星型低聚物线性和非线性光学性质** 636
宫丽晶^{a,c}, 王英惠^{a*}, 康智慧^a, 黄田浩^a, 卢然^b, 张汉壮^{a*} (a. 吉林大学物理学院, 长春 130012; b. 吉林大学化学学院, 长春 130012; c. 空军航空大学, 长春 130022)
摘要: 利用稳态吸收和发射光谱、瞬态吸收光谱、双光子荧光和z扫描技术, 系统地研究了一系列星型苊乙烯撑三聚苊低聚物(Tr-OFV_n, n=1~4)的光物理性质. 结果显示, 苊乙烯撑单元的增加会导致吸收光谱和荧光光谱的带边发生红移, 同时也缩短了激发态物种的寿命. 伴随着π共轭长度的增加, 三聚苊低聚物的双光子荧光效率和双光子吸收截面也逐渐增强. 基于态求和方法数值模拟了材料的双光子吸收截面, 同实验值吻合较好.
关键词: 星型低聚物, 双光子吸收, z扫描
- 儿茶素-胸腺嘧啶分子间相互作用模式的密度泛函研究** 642
蔡皖飞^a, 郑妍^a, 李来才^{a*}, 田安民^b (a. 四川师范大学化学与材料科学学院, 成都 610066; b. 四川大学化学学院, 成都 610064)
摘要: 采用密度泛函理论的B3LYP方法, 在6-31+G*基组水平上研究了儿茶素-胸腺嘧啶分子间相互作用机制, 得到稳定的儿茶素-胸腺嘧啶复合物13个, 并且复合物形成了2个或更多的氢键. 另外, 在相同机组水平上进行了振动分析, 结果表明儿茶素-胸腺嘧啶复合物间存在N-H...O、C-H...O、O-H...O三种类型氢键, 氢键对于复合物的稳定性起着重要的作用. 应用了分子中的原子理论和自然键轨道理论对这13种复合物中氢键的性质和特征进行了分析. 发现所有的氢键复合物进行基组重叠误差校正后的相互作用能为-18.15~-32.99 kJ/mol, 相互作用能主要由氢键所贡献. 振动分析显示, 氢键的形成使相对应键的对称伸缩振动频率减小, 说明这些复合物中形成的氢键都是正常的红移型氢键, 与实验结果相一致.
关键词: 密度泛函理论, 胸腺嘧啶, 氢键, 儿茶素
- CH₂和CH₃自由基吸附在Cu_n(n=1~6)团簇上C-H对称振动模式的软化** 649
成西会^{a*}, 丁大军^b, 余永刚^a, 金明星^b (a. 南京理工大学能源与动力工程学院, 南京 210094; b. 吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130012)
摘要: 利用密度泛函理论中杂化泛函理论方法计算了CH₂和CH₃自由基吸附在Cu_n(n=1~6)团簇上时C-H对称伸缩振动模式的软化性质, 结果表明, CH₂在Cu_n团簇上的吸附要比CH₃的吸附强. 计算得到的C-H键的振动频率与实验上测量的这两个自由基吸附在Cu(111)表面的结果符合得很好, 随着团簇尺寸的增加, C-H对称伸缩振动频率的软化(红移)越来越大.
关键词: 吸附, CH₂和CH₃自由基, Cu团簇, C-H键软化(红移)
- 采用密度泛函理论研究二甲胺-二苯甲酮的分子内电荷转移激发态氢键** 654
初玉玲^a, 杨忠^a, 潘晋峰^c, 刘晶^b, 韩岳泐^b, 丁勇^{b*}, 宋朋^{b*} (a. 赤峰学院物理与电子信息工程系, 赤峰 024001; b. 辽宁大学物理学院, 沈阳 110036; c. 沈阳航空航天大学理学院, 沈阳 110136)
摘要: 利用(含时)密度泛函理论研究了二甲胺-二苯甲酮(DMABP)及其氢键二聚物DMABP-MeOH的光物理性质和弛豫动力学过程. 结果表明, 在非极性和非质子性溶剂中, DMABP分子的第一和第二激发态跃迁同时具有局域激发和分子内电荷转移的特征; 在极性质子性溶剂中, 分子间氢键C=O...H-O的形成增加了这两个最低激发态之间的能量差, 使DMABP-MeOH的第一激发态具有较强极性的分子内电荷转移特性. 通过计算DMABP和DMABP-MeOH分子的激发态构型弛豫势能曲线研究了激发态动力学弛豫过程. 结果表明, 通过扭转二甲胺和二甲胺苯基基团, 达到了一个能量更稳定的扭转了的电荷转移态是激发态构型弛豫的最主要途径; DMABP和醇类分子之间分子间氢键的有效形成会促进其第一激发态到基态之间非辐射跃迁过程的发生.
关键词: 氢键, 分子内电荷转移, 弛豫动力学, 扭转动力学
- 第一原理研究铝锂金属间化合物** 659
于海利, 段晓惠*, 马拥军, 曾敏 (四川省非金属复合与功能材料重点实验室-省部共建国家重点实验室培育基地, 西南科技大学, 绵阳 621010)
摘要: 运用密度泛函理论系统地研究了二元铝锂金属间化合物Al₃Li、AlLi、Al₂Li₃和Al₄Li₉的结构、形成热、弹性和电子结构. 通过计算四种金属间化合物的形成热, 证明了金属间化合物中铝和锂之间具有强烈的化学作用. 在富锂金属间化合物中, 随着锂的含量的增加, 金属间化合物热力学稳定性呈线性减弱. 计算金属间化合物的单晶弹性常数可以得出四种金属间化合物都是机械稳定的. 运用Voigt-Reuss-Hill近似计算了化合物多晶弹性模量、泊松比、化合物体积模量与剪切模量的比值, 表明四种金属间化合物均属于脆性材料; 在化合物中随着锂含量的增加, 金属间化合物体积模量呈线性关系减小.
关键词: 第一性原理, 铝锂金属间化合物, 机械性能, 形成热, 弹性
- 一种新合成的八极矩发色团分子单光子和双光子吸收性质的质子化效应** 666
丁红娟, 孙杰, 王传奎* (山东师范大学物理与电子科学学院, 济南 250014)
摘要: 利用第一性原理基础上发展的一种计算方法研究质子化效应对具有1, 3, 5-三嗪核和吡咯末端基团八极矩分子三嗪的单光子和双光子吸收性质的影响. 结果表明, 当三嗪被质子化时, 该分子的单、双光子吸收性质发生了很大的变化. 一是出现了更多的电荷转移态, 并且吸收带发生了红移; 二是双光子吸收截面得到了很大的增强. 质子化效应有利于提高分子内电荷转移的强度, 定性地解释了实验工作. 并提出了一种基于化合物三嗪质子化效应的双光子吸收转换开关.
关键词: 质子化效应, 双光子吸收, 响应场理论, 八极矩分子
- 碱金属封装到氧化锌纳米笼的第一原理研究** 671
Mohammad T. Baei^a, Ali Ahmadi Peyghan^{b*}, Zargham Bagheri^c (a. 伊斯兰阿扎德大学Azadshahr分校化学系, 戈勒斯坦; b. 伊斯兰阿扎德大学Islamshahr分校青年学者俱乐部, 德黑兰; c. 伊斯兰阿扎德大学Islamshahr分校理学部物理组, 德黑兰)
摘要: 利用密度泛函理论研究了碱金属(Li, Na, K, Ru)封装到Zn₁₂O₁₂纳米笼的过程. 在298 K和100 kPa, Li和Na原子的封装在热力学上是有利的, 吉布斯自由能为负值, 分别为约-130.12和-68.43 kJ/mol. 随着封装原子大小的增加, 封装过程变得不那么有利, 封装K和Rb过程的吉布斯自由能是正值. 结果表明, LUMO、费米能级、尤其是HOMO向更高的能量转移, 以至于HOMO-LUMO能隙明显变窄. 封装后的碱金属簇的功函数由于费米能级转移到更高能量而减少, 因此, Zn₁₂O₁₂团簇的发射电子电流密度增加.
关键词: 密度泛函理论, 纳米簇, 纳米结构, 吸收
- Mg₂(BH₄)₂(NH₂)₂脱氢机理的理论研究** 676
陈征^a, 陈浙宁^a, 吴安安^{a*}, 吴国涛^b, 熊智涛^{b*}, 陈萍^b, 徐昕^{a,c} (a. 厦门大学化学化工学院固体表面物理化学国家重点实验室, 福建省理论和计算化学研究中心, 厦门 361005; b. 中国科学院大连化学物理研究所, 大连 116023; c. 复旦大学化学系能源材料中心, 物质计算科学教育部重点实验室, 分子催化和功能材料上海市重点实验室, 上海 200433)
摘要: 对Mg₂(BH₄)₂(NH₂)₂的脱氢机理展开系统的理论研究发现相对于分子内的脱氢过程, 分子间的脱氢过程在热力学和动力学方面都是比较有利的. Mg₂(BH₄)₂(NH₂)₂脱氢过程的第一步是BH₄⁻中的B-H^{δ-}和NH₂⁻中的N-H^{δ+}结合, 分子间脱去第一个H₂. 随后生成了Mg-H物种, 进而Mg-H^{δ-}...H^{δ+}N之间再次结合脱去H₂.
关键词: 氢储存, 密度泛函理论, 硼氢化合物
- 去质子化精氨酸分子的稳定结构和化学性质** 681
李宏保^{a,b}, 林子敬^{a*}, 罗毅^{a,b} (a. 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; b. 瑞典皇家理工学院生物技术学院理论化学和生物系, 斯德哥尔摩 S-10691)
摘要: 采用从头算方法系统地研究了气相去质子化精氨酸的势能面, 在B3LYP/6-31G(d)水平, 找到了一系列新的稳定构型, 其中能量最低的构型比之前报道的低了6.56 kJ/mol. 精氨酸的去质子化发生在羧基端, 存在两种非同分异构体. 这两种异构体之间存在很高的能垒, 因此有着非常不同的红外光谱特征. 理论计算得到的精氨酸的质子解离能和气相酸性与实验值符合很好.

关键词: 去质子化精氨酸, 能垒, 红外光谱, 气相酸性

利用聚乙烯胺修饰的CaCO₃仿生模板合成3D花朵型二氧化硅微球

郑欣梅, 齐彦兴, 吕功煊* (中国科学院兰州化学物理研究所, 兰州 730000)

摘要: 利用聚乙烯胺(PEI)修饰的碳酸钙仿生模板合成了具有3D花朵型形貌的SiO₂微球.通过调整碳酸钙微粒表面不同浓度PEI的吸附量实现SiO₂微球的形貌控制呈现花朵或刀锋的形状.用XPS和SEM对制备的SiO₂微粒进行表征.结果表明,不用浓度的PEI修饰可以较好地控制3花朵型DSiO₂微球的形貌.

关键词: 花朵型SiO₂, 聚乙烯胺, 碳酸钙, 仿生模板

卵黄鞘磷脂与DOPC相互作用的单层膜

郝长春^{a*}, 孙润广^a, 张静^b (a. 陕西师范大学物理学与信息技术学院, 西安 710062; b. 陕西师范大学食品工程与营养科学学院, 西安 710062)

摘要: 通过分析单层膜在固定表面压力下的过量分子面积和固定分子面积时的过量表面压力研究了卵黄鞘磷脂和1,2-二油酸基磷脂酰胆碱在单层膜中的混合性行为,通过分析过量吉布斯能量、过量亥姆霍兹能量和弹性系数评估了混合脂单层膜稳定性和压缩性.热力学分析表明,相对于两组分理想混合时过量分子面积和过量表面压力呈现出正偏差,表明分子间的相互作用力为排斥力.能量极值点出现在卵黄鞘磷脂含量为0.6处,表明该比例下单层膜结构状态不稳定.排斥力诱导了单层膜中产生相分离.

关键词: 单层膜, 吸引排斥相互作用, 稳定性, 相分离

蓝光激发的基于1-(7-(叔丁基)-9-乙基-9H-咪唑-2-位)-4,4,4-三氟代-1,3-二氧代丁烷为配体的红色发光铈(III)配合物

刘生柱*, 苏文义, 潘荣楷, 周晓平 (湛江师范学院化学科学与技术学院, 湛江 524048)

摘要: 合成了一个新的铈(III)配合物EuL₃(phen)(L为去质子的1-(7-(叔丁基)-9-乙基-9H-咪唑-2-位)-4,4,4-三氟代-1,3-二氧代丁烷, phen为邻菲罗啉).用元素分析、红外、核磁、紫外可见吸收光谱、热重分析、光致发光对该铈配合物进行了表征.热重分析表明配合物的稳定性达到325 °C.光致发光研究表明:该配合物发出强烈红光,其激发光谱延伸到可见光区域.该配合物和460 nm发射的InGaN芯片组合得到了一个具有红光的发射的发光二极管.该铈(III)配合物是蓝光激发的红色发光材料.

关键词: 咪唑β-二酮, 稀土配合物, 化学合成, 发光

1,2-丙二醇辅助溶胶凝胶法制备NASICON型Li_{1.3}Al_{0.3}Ti_{1.7}(PO₄)₃固体电解质

张临超, 陈鹏, 胡章, 陈春华* (中国科学技术大学材料科学与工程系, 合肥 230026)

摘要: 通过1,2-丙二醇辅助的溶胶凝胶法制备了具有NASICON结构的固体锂离子导体Li_{1.3}Al_{0.3}Ti_{1.7}(PO₄)₃,并且通过热重/差热分析、X射线衍射分析、比表面观测、电化学阻抗谱以及计时电流法等对其各方面性能进行了表征.通过使用1,2-丙二醇辅助方法,未额外添加络合剂,也未对pH值进行调整得到均匀的溶胶前驱体,并且通过在850~950 °C不同高温段烧结得到无杂相的具有NASICON结构的Li_{1.3}Al_{0.3}Ti_{1.7}(PO₄)₃产物.850 °C烧结的产物在50 °C下测试,离子电导率为0.3 mS/cm,活化能为36.6 kJ/mol.

关键词: 磷酸钛铝锂, 锂离子导体, NASICON, 电解质, 阻抗谱

采用非共价键合胶束法制备具有插层结构的三聚氰胺/硬脂酸纳米线和囊泡

郭娟, 陈道勇* (复旦大学高分子科学系聚合物分子工程开放实验室, 上海 200433)

摘要: 利用非共价键合胶束的溶剂-非溶剂法制备了具有插层结构的三聚氰胺/硬脂酸复合纳米粒子.非共价键合胶束法的采用不仅实现了三聚氰胺和硬脂酸两组分分子在纳米尺度上的充分混合,而且有效地抑制了三聚氰胺分子自身的结晶行为.这为三聚氰胺分子插入到双层硬脂酸分子结构提供了的保证.研究发现初期制备的三聚氰胺/硬脂酸复合纳米粒子具有不规则的微观形态,通过进一步的退火处理可以得到形态规则的纳米线和囊泡.由于退火处理在一定程度上改变了插层结构,从而进一步导致粒子的形态的改变.

关键词: 有机插层结构, 非共价键合胶束, 退火处理

Ag在CeO_{2-x}(111)薄膜上的生长与电子结构

孔丹丹, 潘永和, 王国栋, 潘海斌, 朱俊发* (中国科学技术大学国家同步辐射实验室, 合肥 230029)

摘要: 利用XPS和RPES技术研究了CeO_{2-x}(111)薄膜表面上的氧

空位对Ag纳米颗粒的生长和电子结构的影响. XPS结果表明,室温下, Ag纳米颗粒在部分还原的CeO_{2-x}(111)薄膜上呈三维岛状生长,并且岛密度比完全氧化的CeO₂(111)薄膜表面上的大,说明氧空位可以作为Ag纳米粒子生长的中心. Ag3d_{5/2}芯能级的结合能随着Ag颗粒尺寸的减小而增大,主要来源于终态效应的贡献. Ag和CeO_{2-x}(111)表面之间存在较弱的相互作用. RPES显示Ce³⁺的4f共振峰强度在沉积Ag纳米颗粒后逐渐增强,表明在CeO_{2-x}(111)表面上Ag的沉积导致部分的Ce⁴⁺被还原成Ce³⁺. 热稳定性实验表明Ag在CeO_{2-x}(111)表面上的烧结温度比在CeO₂(111)表面上略高(约100 K),源于CeO_{2-x}(111)表面上氧空位对Ag纳米颗粒的稳定作用.

关键词: 银, 二氧化铈薄膜, 生长模式, X射线光电子能谱, 共振光电子能谱

ZnO纳米粒子在PS中空微反应器中的合成与光学性能

黄学凤, 琚飞飞, 汪谟贞*, 葛学武 (中科院软物质化学重点实验室, 中国科学技术大学高分子材料科学与工程系, 合肥 230026)

摘要: 通过种子乳液聚合合成核壳结构的聚甲基丙烯酸酯/聚苯乙烯(PMMA/PS)复合微球,通过酸碱溶胀法进一步制备出微米级的PS中空微球.将此中空微球作为微反应器,使在ZnO纳米粒子前驱体溶液中溶胀,最终ZnO纳米粒子在PS中空微球中原位生成.实验表明,组成ZnO纳米粒子前驱体溶液的两种组分(CH₃COO)₂Zn和LiOH的滴加顺序不同对最终生成的ZnO纳米粒子的尺寸和负载效率有很大的影响,但并不改变ZnO纳米粒子的晶型.复合物的光致发光和UV-Vis吸收光谱表明PS壳层有效的避免了ZnO纳米粒子的荧光猝灭效应.

关键词: ZnO/PS复合材料, 核壳结构聚合物微球, 溶胀, PS中空微球, 发光性能

基于电池热特性及产热行为的新型锂离子电池评价

吕喆, 郭勋, 邱新平* (清华大学化学系, 有机光电子及分子工程国家重点实验室, 北京 100084)

摘要: 建立了一种新的基于锂离子电池热特性及产热行为的电池性能评价方法.通过测量一系列不同容量及电极材料的18650电池在不同充放电时间及电流下其充放电能量的变化,建立了一个包含焦耳热与极化热影响因子的表达电池在充放电过程中的能量损失模型.利用这种模型,计算出电池总内阻R以及极化参数η,并且对R及η在不同温度下的变化情况进行了研究,建立一个对不同电池和不同温度都适用的普适性模型.

关键词: 锂离子电池, 能量损失, 放热, 电池内阻, 极化, SOC预测

TiO₂表面质子化对染料敏化太阳能电池性能及吸附染料稳定性的影响

吴昆杰^a, 沈凯^a, 于洋^a, 王德亮^{a,b,c*} (a. 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; b. 中国科学院中国材料科学国家重点实验室, 杭州 310027)

摘要: 采用致密平整TiO₂薄膜作为染料敏化太阳能电池光电极,并研究了HCl处理表面质子化对电池性能的影响.结果表明, HCl处理后电池的短路电流显著提升, 电池的开路电压则有轻微的下降, 电池电流提升了31%, 而能量转化效率则提升了25%.这是因为TiO₂的表面质子化增强了吸附染料与TiO₂间的电学耦合,提高了染料中激发电子向TiO₂导带的注入速率.而电压的下降,一方面是由于质子化会引起TiO₂导带能级的下降,另一方面则是由于质子化会一定程度上提高TiO₂导带电子与电解质的复合速率.采用原位拉曼方法研究质子化对TiO₂吸附染料的稳定性的影响,结果表明质子化可提高染料在开路条件下的稳定性,这主要是由于质子化可以提高染料激发电子的注入速率,从而使染料处于不稳定的激发态的时间变短.另外,质子化提升了TiO₂导带电子与电解质的复合速率,也会对染料稳定性产生一定影响.

关键词: 染料敏化太阳能电池, 表面质子化, 激发态电子注入, 复合, 稳定性

淮北市地区大气污染的光学遥感监测与预报

李素文^{a,b*}, 谢品华^b, 姜恩华^a, 张勇^a, 戴海峰^a (a. 淮北师范大学物理与电子信息学院, 淮北 235000; b. 中国科学院合肥物质科学研究院, 合肥 230031)

摘要: 在淮北市地区建立差分吸收光谱遥感系统,监测淮北市地区主要大气污染气体,监测时间从2011年8月7日至8月28日.结果表明污染物排放达到国家标准.并以臭氧为例建立污染气体浓度变化趋势跟踪预测模型.

关键词: 光学遥感, 大气污染, 淮北地区, 监测, 预报