

## Chinese Abstracts (中文摘要)

## 适用于表面分析的小型低能电子显微镜

张冠华<sup>a\*</sup>, 孙巨龙<sup>a</sup>, 金艳玲<sup>a</sup>, 臧佩<sup>b</sup>, 郭方准<sup>b</sup>, 杨学明<sup>a\*</sup> (a. 中国科学院大连化学物理研究所, 大连 116023; b. 大连交通大学, 大连 116028)

**摘要:** 介绍并表征了一套单法兰集成的低能电子显微镜. 这套显微镜中采用了 $10^\circ$ 偏转角的磁分束器, 从而有利于将其集成到一个10 in的法兰上. 电子光学系统中的一些修正单元被简化, 以使其结构简单, 容易操作. 样品被置于地电位, 方便各静电透镜浮在高电压上. 通过几个实验展示了这台显微镜在典型的低能电子成像、低能电子衍射和光电子成像模式下的性能. 低能电子成像的空间分辨率为51 nm. 利用飞秒激光做光源, 相应的非线性光电子发射过程使得这台设备非常适合进行光学近场现象的观察, 并获得110 nm的光电子成像空间分辨率.  
**关键词:** 低能电子显微镜, 单法兰集成, 飞秒激光, 空间分辨率, 小偏转角

Xe原子偶宇称 $5p^5(2P_{1/2})nl'[K']J(l'=1, 3)$ 自电离态共振增强激发光谱线形研究

李春燕<sup>a\*</sup>, 王婷婷<sup>b</sup>, 甄军锋<sup>b</sup>, 陈旸<sup>b\*</sup>, 何志巍<sup>a</sup> (a. 中国农业大学理学院, 北京 100083; b. 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:** 利用脉冲直流放电技术制备的Xe原子亚稳态 $5p^56s[3/2]_2$ 和 $5p^56s'[1/2]_0$ , 在单光子为 $28000\sim 42000\text{ cm}^{-1}$ 能量范围内, 结合飞行时间质谱技术获得Xe原子 $5p^5np'[3/2]_1$ ,  $[1/2]_1$ 和 $5p^5n'l'[5/2]_3$ 自电离Rydberg态的共振增强激发光谱. 根据Fano线形公式对呈现明显不对称线形的激发谱进行系统地分析, 获得系统的能级位置、量子亏损、线性因子、共振宽度、共振态寿命和衰减宽度等数据, 其中线形因子和共振宽度相对有效量子数呈线性关系. 另外分析了 $5p^5np'$ 序列的能级间距.  
**关键词:** Xe原子, 自电离态, Fano线形

## 烯丙醇和烯丙硫醇构象的Dyson轨道和电离能

杨聚宝, 王美婷, 王克栋<sup>\*</sup>, 刘玉芳 (河南师范大学物理与电子工程学院, 新乡 453007)

**摘要:** 用B3LYP/aug-cc-pVTZ方法研究了烯丙醇和烯丙硫醇的构象. 采用MP3、MP4(SDQ)和CCSD(T)方法计算了它们的相对能量, 这两种分子 $G_g'$ 构象均最稳定. 根据理论计算的电离能模拟的光电子能谱说明在气相实验中烯丙醇和烯丙硫醇至少存在四种构象. 烯丙硫醇最外壳层和次外壳层的Dyson轨道均显示出强烈的 $n_S$ 和 $\pi_{C=C}$ 混合特征, 这是由于S的孤对电子轨道和C=C  $\pi$ 轨道之间的共振效应和诱导效应引起的.  
**关键词:** 从头算, 电离能, 光电子能谱, Dyson轨道

## 聚(9,9-二辛基芴)和聚(9,9-二辛基芴-共-苯并噻二唑)的光物理特性的理论和实验研究

张里荃<sup>a,c</sup>, 王英惠<sup>a,b\*</sup>, 隋宁<sup>a</sup>, 康智慧<sup>a</sup>, 黄田浩<sup>a</sup>, 马於光<sup>b</sup>, 张汉壮<sup>a\*</sup> (a. 吉林大学物理学院飞秒激光实验室, 长春 130012; b. 吉林大学超分子结构和材料国家重点实验室, 长春 130012; c. 吉林大学和四平校区公共教学中心, 长春 130012)

**摘要:** 通过比较分析聚(9,9-二辛基芴)(PFO)和聚(9,9-二辛基芴-共-苯并噻二唑)(F8BT), 对半导体聚合物的光物理特性进行了系统研究. 量子化学计算显示, 苯并噻二唑单元的引入促进了链内电荷转移(ICT), 调节了聚合物的电子跃迁机制. 瞬态吸收测定表明, 在单分散系统中的受激PFO衰减时主要表现为链内激子弛豫. 在F8BT溶液中, ICT状态出现, 并参与到激发态的弛豫过程中. 凝聚相中PFO和F8BT的弛豫过程加速和显示了在高激发强度下具有显著的激子湮灭行为. 在相同的激发强度下, F8BT的平均寿命长于PFO, 有助于实现良好的电荷分离.  
**关键词:** 共轭聚合物, 瞬态吸收光谱, 链内电荷转移

## 表面偶极子对扫描电子显微镜共振电子注入的影响

吴启辉<sup>a\*</sup>, 吴顺情<sup>b</sup>, C. I. Pakes<sup>c</sup> (a. 泉州师范学院化学与生命科学学院, 泉州 362000; b. 厦门大学物理系, 厦门 361005; c. 澳大利亚拉筹伯大学物理系, 维多利亚州 3086)

**摘要:** 用共振电子注入法和第一性原理计算研究了硒(Se)单原子在Si(111)- $7\times 7$ 表面的吸附. 理论结果表明由于不同的电负性, 表面Si原子会向吸附的Se原子发生电子转移, 从而导致一个0.61 eV的表面偶极子形成. 该表面偶极子改变了Si表面的有效隧道能垒同时导致在样品和扫描电子显微镜针尖之间真空隙中共振态能级的移

动. 并且0.61 eV的表面偶极子会引起共振电子注入偏压向高电位移动0.45 V.  
**关键词:** 表面偶极子, 硒, 扫描隧道显微镜, 共振注入

## 三苯基吡咯金属配合物的振动光谱和DFT计算

高慧玲, 陈方, 王春雷, 王国兵, 陈东明<sup>\*</sup> (中国科学技术大学化学物理系, 合肥 230026)

**摘要:** 对三苯基吡咯金属配合物(MTPC, M=Ni, Cu, Co, Mn)的拉曼和红外光谱进行了实验研究. 用DFT方法计算了其基态几何结构以及红外和拉曼光谱, 并基于计算结果对测量到的振动谱带进行了局域坐标归属. 研究发现, 由于对称性降低, 吡咯金属配合物的振动光谱比吡咯金属配合物更为复杂, 若干吡咯骨架振动与苯取代基强烈耦合. 考察了拉曼和红外谱带频率变化与吡咯环结构的关系, 发现随着环内核尺寸的减小, 与 $C_{\alpha}^1C_{\alpha}^1$ 键伸缩振动和 $C_{\alpha}C_m$ 键伸缩振动相关的拉曼谱带频率增加, 其中 $C_{\alpha}^1C_{\alpha}^1$ 伸缩振动的拉曼谱带对环内核尺寸的变化更为敏感且呈良好的线性关系, 可以作为反映金属吡咯骨架结构变化的特征谱带.  
**关键词:** 金属吡咯, 拉曼光谱, 分子振动, DFT

## 芴酮及苯并噻二唑取代的低聚芴环光学特性的理论研究

宋建<sup>\*</sup>, 刘玉芳 (河南师范大学物理与电子工程学院, 新乡 453007)

**摘要:** 从链形态、热振动及共轭特性等方面系统的研究了芴酮及苯并噻二唑取代的低聚芴环引起的光学性质的变化. 采用从头算和含时密度泛函方法计算了模型体系的垂直吸收光谱和包含振动结构的吸收和发射光谱. 通过合理的考虑低聚芴环间扭转模式的非谐性效应, 理论光谱和实验光谱得到了很好的吻合. 芴链上掺杂的芴酮和苯并噻二唑均具有电子捕获特性, 使得整个分子的吸收带变宽且发射光谱红移, 从而起到了调制纯芴链发光特性的作用. 当温度升高时, 芴酮掺杂的低聚芴的光谱谱型会变得复杂, 含有更多的振动结构. 苯并噻二唑掺杂的低聚芴的光谱线型始终比较光滑, 几乎没有振动结构, 这是因为在低频模式在苯并噻二唑环上很难找到共振. 苯并噻二唑掺杂的低聚芴的激发态势能面更平缓, 这有利于增强电子的离域, 从而得到更大的光谱红移.  
**关键词:** 低聚芴, 吸收和发射光谱, 振动分辨, 含时密度泛函

## 钌催化多氟代芳烃与简单芳烃的氧化C-H/C-H偶联反应机理

唐诗雅, 于海珠<sup>\*</sup>, 尤万里, 郭庆祥<sup>\*</sup> (中国科学技术大学化学系, 合肥 230026)

**摘要:** 运用密度泛函方法研究了醋酸钌催化的五氟苯与苯的氧化C-H/C-H偶联反应机理. 主要考察了以下四种不同可能机理路径: A 苯C-H活化发生在五氟苯C-H活化前, B 五氟苯C-H活化发生在苯C-H活化前, C 苯C-H活化后与五氟苯银化合物发生转金属化, D 首先五氟苯银化合物与醋酸钌转金属化, 然后发生苯的C-H活化步骤. 计算结果表明, 两个反应底物(五氟苯与苯)的C-H活化顺序在不同反应条件下是不同的, 其中银盐的存在与否是决定因素. 在无银盐条件下, 反应的优势路径是机理B. 在银盐存在条件下, 五氟苯银盐与钌中心的配位非常容易, 但是其生成的中间体难以引导后续的苯环C-H活化步骤, 使得整个反应能垒较高. 因此, 银盐的存在使得机理C的能量相对优势, 该机理与机理A相似. 计算结果与氢/氘交换实验及动力学同位素效应的实验结果一致.  
**关键词:** 钌催化, 氧化偶联, C-H活化, 机理, 密度泛函, 五氟苯

一维锰氧化物纳米棒在以O<sub>2</sub>为氧源的苯甲醇氧化反应中的催化性能

杨晶<sup>a</sup>, 华青<sup>a,b,c</sup>, 常苏捷<sup>a,b,c</sup>, 于先琴<sup>a</sup>, 马运生<sup>a\*</sup>, 黄伟新<sup>a,b,c</sup> (a. 中国科学技术大学化学物理系, 合肥 230026; b. 中国科学技术大学中国科学院能量转换材料重点实验室, 合肥 230026; c. 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:** 采用水热法合成MnOOH一维纳米线, 通过MnOOH在不同气氛和温度中煅烧得到尺寸和形貌相似的不同锰氧化物, 并用于以O<sub>2</sub>为氧源的苯甲醇液相氧化反应. 结果表明, MnO<sub>2</sub>对苯甲醇氧化反应具有较高的催化活性. 通过XPS、SEM、TEM和H<sub>2</sub>-TPR等手段对催化剂的形貌和结构进行了表征, 并讨论了可能影响反应活性的一些因素. MnO<sub>2</sub>的良好催化性能可能与其晶格氧具有较高的迁移率以及氧化还原能力有关. 通过简单的焙烧处理, 可以使MnO<sub>2</sub>催化剂在苯甲醇氧化反应中具有有良好的重复使用性.  
**关键词:** 锰氧化物, 纳米棒, 苯甲醇氧化, XPS, H<sub>2</sub>-TPR

**Pd/Ag掺杂的La<sub>0.67</sub>(Ca<sub>0.65</sub>Ba<sub>0.35</sub>)<sub>0.33</sub>MnO<sub>3</sub>体系电特性和磁电阻增强效应**..... 431

原晓波\*, 任俊峰(山东师范大学物理与电子科学学院, 济南 250014)

**摘要:** 系统研究了 $x\text{Ag-La}_{0.67}(\text{Ca}_{0.65}\text{Ba}_{0.35})_{0.33}\text{MnO}_3$ 和 $x\text{Pd-La}_{0.67}(\text{Ca}_{0.65}\text{Ba}_{0.35})_{0.33}\text{MnO}_3$ ( $x\text{Ag-LCBMO}$ 和 $x\text{Pd-LCBMO}$ )两种复合体系的电特性和磁电阻特性. 结果发现, Pd和Ag的掺杂都引起电阻率的大幅降低和峰值电阻率温度的升高, 这主要源于晶粒边界/表面良导体金属晶粒的析出. 另外, Pd和Ag的掺杂都引起室温磁电阻的大幅增强. 尤其是27%摩尔比的Ag掺杂诱导了高达70%的室温磁电阻, 几乎是未掺杂母体LCBMO的10倍, 而27%摩尔比的Pd掺杂诱导产生了更高的磁电阻, 约170%. 磁电阻的大幅增强, 与良导体金属掺杂引起的样品电阻率的降低有关. 另一方面, 晶粒表面/边界Mn离子与Pd离子接近诱导Pd离子的自旋极化对磁电阻的增强起了重要的促进作用.

**关键词:** 庞磁电阻效应, Ag掺杂锰氧化物, Pd掺杂锰氧化物, 室温磁电阻效应, 自旋团簇, Pd原子的磁极化效应

**离子液体凝胶聚合物电解质PP13TFSI-LiTFSI-P(VdF-HFP)的电化学性能**..... 439

杨培霞\*, 刘磊, 侯俊, 张锦秋(哈尔滨工业大学化工学院, 哈尔滨 150001)

**摘要:** 采用溶液浇铸法将N-甲基-N-丙基哌啶二(三氟甲基磺)亚胺(PP13TFSI)、二(三氟甲基磺)亚胺锂与偏氟乙烯-六氟丙烯共聚物(P(VdF-HFP))混合制备离子液体凝胶聚合物电解质(ILGPEs). 通过扫描电子显微镜观察发现, 这种离子液体凝胶聚合物电解质由于液体相的均匀分布而具有疏松的结构. 采用电化学阻抗、计时电流法、线性扫描伏安法测试了电解质的离子电导率、锂离子迁移数和电化学窗口. 室温下离子液体凝胶聚合物电解质的离子电导率和锂离子迁移数分别是0.79 mS/cm和0.71, 电化学窗口为0~5.1 V vs. Li<sup>+</sup>/Li. 电池性能测试表明, 这种离子液体凝胶聚合物电解质在Li/LiFePO<sub>4</sub>电池中是稳定的, 放电容量在30、75和150 mA/g倍率下分别为135、117和100 mAh/g, 电池经100个循环后容量保持在100%而几乎没有衰减.

**关键词:** PP13TFSI, P(VdF-HFP), 锂离子电池, 离子液体, 聚合物电解质

**聚氨酯/POSS纳米复合材料的制备及阻燃性能**..... 445薛萌<sup>a</sup>, 张献<sup>a,b</sup>, 吴钊峰<sup>a</sup>, 王欢<sup>a</sup>, 丁欣<sup>a</sup>, 田兴友<sup>a\*</sup>(a. 中国科学院固体物理研究所, 中国科学院材料物理重点实验室, 合肥 230031; b. 安徽华菱电缆集团有限公司, 无为 238371)

**摘要:** 利用笼形倍半硅氧烷(POSS)纳米粒子与二苯基甲烷-4,4'-二异腈酸酯之间的相容性, 采用聚合合法合成聚氨酯/POSS纳米复合材料. 扫描电镜及红外光谱测试表明POSS粒子均匀分散在聚氨酯基体中, 热重分析、氧指数及垂直燃烧测试表明: POSS能使复合材料的热稳定性和阻燃性能得到提升.

**关键词:** 聚氨酯, 笼形倍半硅氧烷, 阻燃, 纳米复合材料, 聚合反应

**花状NaY(MoO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>的合成和NaY(MoO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>:Eu<sup>3+</sup>的光学性质**..... 451

张悠金\*, 祝玮, 何红梅, 郑傲(中国科学技术大学化学系, 合肥 230026)

**摘要:** 用微波辅助水热-煅烧法成功合成了花状NaY(MoO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>颗粒, 用XRD、XPS、FESEM进行了表征, 提出了花状NaY(MoO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>颗粒可能的形成机理. 采用相同的方法合成了NaY(MoO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>:Eu<sup>3+</sup>荧光体, 该荧光材料在612 nm处有一个强的发射峰, 可用作白色发光二极管的红色磷光剂. 此外, 微波辅助水热-煅烧法可能发展成为制备其他花状稀土铝酸盐的有效途径.

**关键词:** NaY(MoO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>, 花状, 水热法, 纳米材料, 机理, 光谱

**铝掺杂ZnMnO纳米晶体的载流子调控铁磁性**..... 457Shahid Atiq<sup>a\*</sup>, Saadat A. Siddiqi<sup>a,b</sup>, Fazal Abbas<sup>a</sup>, Murtaza Saleem<sup>a</sup>, Shahid M. Ramay<sup>c</sup>(a. 巴基斯坦旁遮普邦大学奎德-艾-阿扎姆分校固态物理研究中心, 拉合尔 54590; b. 巴基斯坦COMSATS信息技术研究院生物医学材料交叉学科研究中心, 拉合尔; c. 沙特阿拉伯国王大学工程学院化学工程系, 利雅得 11421)

**摘要:** 通过溶胶-凝胶自燃烧技术合成了Zn<sub>0.95-x</sub>Al<sub>x</sub>Mn<sub>0.05</sub>O( $x=0, 0.03, 0.05$ 和 $0.07$ )稀磁半导体材料. 并且研究了Al掺杂对Zn<sub>0.95-x</sub>Al<sub>x</sub>Mn<sub>0.05</sub>O结构、电学和磁学性质的效果. X射线衍射显示合成的组合物为单相六方晶系纤锌矿型晶体结构, 类似于氧化锌. 显微图像显示颗粒呈团簇状, 但一些单个颗粒呈现六角形纹理. 观察

到的电阻率随温度升高(达450 °C)而降低, 显示为半导体行为特征. 所有组合物具有室温铁磁行为. 饱和磁化强度的值随着Al(载流子)浓度的增加而增加.

**关键词:** 稀磁半导体材料, 溶胶-凝胶, Al掺杂ZnMnO, 铁磁性

 **$\beta$ -HMX基PBXs包覆行为的介观模拟**..... 462崔红玲<sup>a\*</sup>, 姬广富<sup>b</sup>, 陈向荣<sup>c</sup>, 魏冬青<sup>d</sup>(a. 河南科技大学物理与工程学院, 洛阳 471023; b. 中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆炸物理国家重点实验室, 绵阳 621900; c. 四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610064; d. 上海交通大学生命科学技术学院, 上海 200240)

**摘要:** 通过耗散粒子动力学方法研究了 $\beta$ -HMX(环四次甲基四硝基胺)基聚合物在室温下的介观结构. 并在此基础上, 研究了不同温度时 $\beta$ -HMX与不同聚合物之间的排斥参数及 $\beta$ -HMX基PBXs的介观结构. 结果表明,  $\beta$ -HMX与偏氟乙烯、 $\beta$ -HMX与三氟氯乙烯及偏氟氯乙烯与三氟氯乙烯结构单元间的相溶性随着温度的升高不断增强. 温度及聚合物的摩尔比在其相互包覆行为中起着重要作用, 且存在最佳的温度及摩尔比.

**关键词:** 耗散粒子动力学, 介观结构,  $\beta$ -HMX基PBXs

**六氟偏磷酸锂的热分解动力学**..... 467

刘晓敏\*, 杨晖(南京工业大学材料科学与工程学院, 南京 210009)

**摘要:** 采用在线耦合TGA-FTIR技术, 分别研究了非等温和等温两种条件下六氟偏磷酸锂(LiPF<sub>6</sub>)的热分解动力学和其气态产物. 结果表明LiPF<sub>6</sub>分解反应为单步反应, 其产物为固态LiF和气态PF<sub>5</sub>. 在两种条件下, LiPF<sub>6</sub>分解动力学均遵循基于柱坐标对称的二维相界面移动模型. LiPF<sub>6</sub>分解活化能为104 kJ/mol(非等温)和92 kJ/mol(等温).

**关键词:** 六氟偏磷酸锂, 分解动力学, 在线耦合TGA-FTIR

**电化学红外光谱研究铂电极上甲酸分解成CO的反应中桥式吸附甲酸根的作用**..... 471

张尊彪, 徐杰, 康婧, 陈艳霞\*(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, 合肥 230026)

**摘要:** 采用电化学原位红外光谱技术研究了多晶Pt电极上甲酸的分解反应. 研究发现, 在恒电位下(0.4 V vs. RHE)从不含甲酸的支持电解质溶液切换到含甲酸的溶液时, CO<sub>ad</sub>的生成速率在切换的最初也就是甲酸根的覆盖度为零最大, 切换后的1 s内甲酸根的覆盖度达到平衡, 而CO<sub>ad</sub>的生成速率逐步降低.  $E$ 由0.75 V变至0.35 V的电位阶跃实验显示: 电位阶跃后的瞬间, 甲酸根的红外光谱强度迅速降低, 而CO<sub>ad</sub>的生成强度随时间缓慢增加. 实验表明甲酸根不是甲酸脱水生成CO的反应活性中间体.

**关键词:** 甲酸脱水机理, CO路径, 铂电极, 甲酸根中间体

**生物油催化裂解转化制取三苯**..... 477

朱九方, 汪继聪, 李全新\*(中国科学技术大学化学物理系, 合肥 230026)

**摘要:** 通过不同孔特征的分子筛(HZSM-5、HY沸石和MCM-41)实现生物油催化转化为三苯(苯、甲苯和对甲苯). 基于三苯的产率和选择性, 芳香化合物逐次降低顺序为: HZSM-5>MCM-41>HY沸石. 用HZSM-5催化裂解生物油产生芳香化合物的最大产率为33.1%, 选择性为86.4%. 研究了反应条件对生物油催化裂解的影响, 结合催化剂表征结果, 讨论了催化剂的结构与性能之间的关系.

**关键词:** 生物油, 三苯, 催化裂解

**有机种子对异戊二烯光氧化反应形成二次有机气溶胶的粒谱演化和形成速率的影响**..... 484

程跃, 胡长进, 盖艳波, 顾学军, 赵卫雄, 黄伟\*, 张为俊\*(中国科学院安徽光学精密机械研究所大气物理化学研究室, 合肥 230031)

**摘要:** 基于室内烟雾箱实验平台, 研究了在有机种子气溶胶下, 来自OH启动异戊二烯光氧化反应形成的二次有机气溶胶的动力学. 探究了二次有机气溶胶的粒谱分布分别与来自室内大气中痕量碳氢化合物光氧化反应产生的种子颗粒物浓度以及前体物异戊二烯浓度的依赖关系. 研究结果表明在高浓度种子气溶胶和低浓度异戊二烯条件下(对应于典型城市大气条件), 光化学反应形成的二次有机产物凝聚到种子颗粒物表面而造成的颗粒物增长起主导作用; 而在低浓度种子气溶胶和相对高浓度异戊二烯条件下(对应于典型偏远地区大气条件), 二次有机气溶胶粒谱分布出现双模式结构, 分别对应于来自均相成核的新粒子生成和二次有机产物在种子颗粒物上的凝聚增长. 此外, 还研究了有机种子颗粒物浓度对二次有机气溶胶形成的影响, 评估了在不同种子浓度下二次有机气溶胶粒谱分布的演化和相应新粒子的形成速率.

**关键词:** 光化学反应, 异戊二烯, 有机种子气溶胶, 成核, 凝聚