

Chinese Abstracts (中文摘要)

基于氧化锌纳米薄片的高性能增强型场效应管和紫外光传感器 1
高志伟, 吴昱昆, 李俊文, 王晓平* (中国科学技术大学物理系, 合肥 230026)

摘要: 借助气相输运凝法成功制备出数纳米厚的氧化锌纳米薄片并充分研究其结构与光学性质. 利用此薄片构建出场效应管和紫外光传感器. 由于其独特的结构, 此场效应管被证实为 n 沟道增强型并具有好的电学特性, 其场效应迁移率可达 $256 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$, 开关比约为 10^8 . 而且其紫外光传感器的光响应也可显著提高到 3×10^8 .

关键词: 氧化锌, 纳米薄片, 场效应管, 紫外传感器

基于半导体激光的光腔衰荡光谱装置测定水汽含量 6
陈兵^a, 康鹏^a, 李建英^b, 贺晓雷^b, 刘安雯^a, 胡水明^{a*} (a. 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; b. 中国气象局大气探测中心, 北京 100081)

摘要: 搭建了一套基于光腔衰荡光谱技术的光学湿度计. 通过测量水分子在 1.35 和 $1.56 \mu\text{m}$ 波段不同强度的吸收线, 可测定水汽的相对含量, 测量范围从 10^{-2} 到低至 10^{-12} 水平. 通过与商用冷镜式露点仪的对比测量, 对该装置的定量精度进行了检验. 该系统所具备的高灵敏度使得水汽探测极限可达 8 pptv .

关键词: 光腔衰荡, 湿度, 半导体激光光谱

二氧化钛薄膜表面甲醇吸附的和频振动光谱 11
冯冉冉^{a,b}, 刘安安^{a,b}, 刘烁^{a,b}, 施骄健^{a,b}, 刘怡^{a,b}, 任泽峰^{a*} (a. 北京大学物理学院量子材料科学中心, 北京 100871; b. 量子物质科学协同创新中心, 北京 100871)

摘要: 自行搭建了用于研究表面光催化的宽带红外和频振动光谱并可以原位紫外光激发的装置. 利用自制的结构紧凑小巧的高真空样品池, 可以在 10 kPa 氧气氛围下经原位紫外光照除掉射频磁控溅射制备的二氧化钛薄膜表面的有机污染物. 通过在室温下改变甲醇气压和指认吸附在薄膜表面的甲醇的和频振动光谱, 发现薄膜表面有两种吸附的甲醇, 分子形式吸附的甲醇(CH_3OH)和解离吸附的甲醇(CH_3O). 当甲醇的覆盖度由低变高时, 分子形式吸附的甲醇的 CH_3 的对称伸缩振动和费米共振峰红移了 $6\sim 8 \text{ cm}^{-1}$. 真空下, 薄膜表面的甲氧基和表面的氢原子可以重新结合并以甲醇分子的形式脱附. 研究表明二氧化钛薄膜体系存在两个平衡: 气相甲醇和表面吸附的甲醇分子之间, 以及表面吸附的甲醇分子和甲氧基之间.

关键词: 表面和频振动光谱, 表面光催化, 二氧化钛

气相二氧化碳分子拉曼退偏比的准确测量 17
靳玉娟^a, 喻远琴^{a*}, 王钰熙^b, 林珂^b, 周晓国^b, 刘世林^b (a. 安徽大学物理与材料科学学院, 合肥 230039; 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: 利用灵敏的光声拉曼光谱技术对气相二氧化碳分子在 $1240\sim 1430 \text{ cm}^{-1}$ 振动光谱的拉曼退偏比进行了测量. 通过测量并拟合光声拉曼信号强度随两束入射光偏振方向夹角的变化, 得到了比文献报道中更为精确的退偏比数据.

关键词: 退偏比, 准确测量, 光声拉曼光谱, 全局拟合

利用超短紫外光源增强阿秒脉冲的强度 21
冯志强^{a,b*}, 刘航^{c*} (a. 辽宁工业大学理学院, 锦州 121001; b. 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; c. 辽宁工业大学化学与环境工程学院, 锦州 121001)

摘要: 提出了一种利用超短紫外光源来增强阿秒脉冲强度的方法. 计算结果表明, 当适当的加入一束 125 nm 光源到双色正交激光场时, 不仅高次谐波的强度比原双色场时增强了2个数量级, 而且选择单一的量子路径对谐波发射起作用, 进而形成了一个 152 eV 的超长平台区. 随后通过激光参数的优化, 发现激光脉宽和偏振角对于谐波强度的增强不太敏感. 最后, 通过叠加谐波可获得脉宽仅为 38 as 的孤立阿秒脉冲, 其强度比原双色场情况下产生的阿秒脉冲增强了2个数量级.

关键词: 高次谐波, 孤立脉冲, 双色正交场, 紫外光源

N, N -二甲基硫代乙酰胺 $S_3(\pi\pi^*)$ 态的衰变动力学 27
陈笑^a, 薛佳丹^a, 郑旭明^{a,b,c*} (a. 浙江理工大学化学系, 杭州 310018; b. 浙江理工大学先进纺织材料与制备技术教育部重点实验室, 杭州 310018; c. 浙江理工大学生态染整及纺织品加工教育部工程研究中心, 杭州 310018)

摘要: 采用共振拉曼光谱和完全活化空间自洽场方法研究了 N, N -二甲基硫代乙酰胺在被激发至 $S_3(\pi\pi^*)$ 态后的衰变动力学. 指认了紫外吸收光谱和振动光谱. 获得了乙腈、甲醇和水溶剂中不同激发波长下的A带共振拉曼光谱, 以探测Franck-Condon区域的结构动力学. 开

展了CASSCF计算以确定低能单重激发态和锥形交叉点的电子激发能和优化几何结构. 通过共振拉曼强度分析和CASSCF计算获得了结构参数、A带结构动力学和 $S_3(\pi\pi^*)$ 态衰减机制. 提出了主要衰减通道为 $S_3, F_C(\pi, \pi^*) \rightarrow S_3(\pi, \pi^*)/S_1(n\pi^*) \rightarrow S_1(n\pi^*)$.

关键词: N, N -二甲基硫代乙酰胺, 结构动力学, 衰变动力学, 共振拉曼光谱, CASSCF计算, 锥形交叉点

2-氟乙醇分子外价轨道的电子动量谱学 35
史钰峰^a, 单旭^{a,b*}, 王恩亮^{a,b}, 阳弘江^a, 张卫^a, 陈向军^{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(筹), 近代物理系, 合肥 230026; b. 量子信息与量子科技前沿协同创新中心, 合肥 230026)

摘要: 利用不共面不对称(e,2e)谱仪测量了2-氟乙醇分子外价分子轨道的束缚能谱和电子动量分布, 并用外价格林函数方法和密度泛函理论计算了分子的电离能和轨道波函数. 通过理论计算与实验结果的比较, 明确标识了实验测量的电离能谱. 考虑了2-氟乙醇分子五种异构体的玻尔兹曼热力学统计权重后, 理论计算的电子动量分布能够较好地解释实验测量结果.

关键词: (e,2e)电子动量谱学, 2-氟乙醇, 构象异构体, 密度泛函理论

通过双 Σ 型激光方案控制振动态布居转移 43
李立航, 韩永昌*, 丛书林 (大连理工大学, 物理与光电工程学院, 大连 116024)

摘要: 通过使用含时量子波包方法, 对HF分子该类型的布居转移动力学进行了研究. 提出双 Σ 型激光控制方案, 用于控制布居从 $|v=16\rangle$ 能级向 $|v=0\rangle$ 能级进行转移. 该方案的第一步是将布居从 $|v=16\rangle$ 经过中间能级 $|v=11\rangle$ 向 $|v=7\rangle$ 转移, 第二步是将布居从 $|v=7\rangle$ 经过中间能级 $|v=3\rangle$ 向 $|v=0\rangle$ 转移. 在每一个步骤中, 三个振动能级在两束重叠的激光脉冲作用下形成一个 Σ 型的布居转移路径. 通过优化激光的强度、频率和延迟时间, 得到了最大的布居转移效率. 计算并比较了正序脉冲和反序脉冲两种情况, 在这两种情况下, 布居都可以超过90%从 $|v=16\rangle$ 能级向 $|v=0\rangle$ 能级进行转移.

关键词: 布居转移, 波包动力学, 振动态

六硝基萘溶液的 $\nu_s(\text{NO}_2)$ 激发及弛豫过程的相干反斯托克斯拉曼光谱 49
储根柏^a, 税敏^a, 宋云飞^b, 徐涛^c, 谷渝秋^{a*}, 杨延强^b (a. 中国工程物理研究院激光聚变研究中心高能密度物理研究部, 绵阳 621900; b. 哈尔滨工业大学物理系, 哈尔滨 150001; c. 中国工程物理研究院化工材料研究所, 绵阳 621900)

摘要: 研究含能材料的振动激发和弛豫过程能深入理解含能材料的超快动态响应过程. 利用亚皮秒分辨的相干反斯托克斯拉曼(CARS)技术, 实验直接观察基态的六硝基萘溶液中 $\nu_s(\text{NO}_2)$ 激发峰位于 1385 cm^{-1} , 弛豫时间为 0.38 和 8.5 ps . 飞秒CARS实验观察到相应的拍频现象.

关键词: 六硝基萘, 硝基伸缩振动, 相干反斯托克斯拉曼

基于时间分辨光谱技术的ZnCuInS/ZnSe/ZnS量子点的激子弛豫动力学 54
李雪聰^{a*}, 隋宁^b, 张宇^{c*} (a. 天津工业大学应用物理系, 天津 300387; b. 吉林大学物理学院, 长春 130012; c. 吉林大学电子科学与工程学院, 集成光电子学国家重点实验室, 长春 130012)

摘要: 通过时间分辨光谱技术详细地研究了ZnCuInS/ZnSe/ZnS量子点的激子弛豫动力学. 基于速率分布模型, 波长依赖的发射动力学表明本征激子、界面缺陷态中的激子、给-受体对态中的激子都会参与量子点的发光过程, 整个发光过程主要依赖于给-受体对态发射. 瞬态吸收数据表明激发后本征激子和界面缺陷物种可能会同时出现, 在高激发光强下, 光强依赖的俄歇复合过程也存在于量子点中.

关键词: 量子点, 时间分辨光谱, 激子弛豫动力学

神经网络法研究多溴代二苯胺热力学性质 59
堵锡华*, 庄文昌, 史小琴, 冯长君 (徐州工程学院化学化工学院, 徐州 221111)

摘要: 基于溴取代位置及邻接矩阵, 定义新的取代基指数 0X , 并计算了二苯胺和209个多溴代二苯胺的分子形状指数 K_m 和电性距离矢量 M_m , 经最佳变量子集回归建立了210种该有机污染物热力学性质与 0X 、 K_3 、 M_{29} 、 M_{36} 指数的定量结构-性质相关性(QSPR)模型. 将这4个结构参数作为BP神经网络的输入

层结点, 分别采用4:21:1、4:24:1、4:24:1的网络结构, 利用BP算法获得了三个令人满意的QSPR模型, 其总相关系数 R 分别为0.9999、0.9997和0.9995, 标准误差分别为1.036、1.469和1.510, 利用该模型得到的 S° 、 $\Delta_f H^\circ$ 和 $\Delta_f G^\circ$ 的预测值, 与文献值的相对平均误差分别为0.11%、0.34%和0.24%, 两者吻合度非常理想, 说明该模型具有很好的稳定性、相关度和预测能力, 结果表明多溴代二苯胺的热力学性质与 0X 、 K_3 、 M_{29} 和 M_{36} 有很好的非线性关系, 证明利用新定义的取代基指数建立的ANN模型对多溴代二苯胺性质的预测是合理的、适用的。

关键词: 多溴代二苯胺, 神经网络, 分子形状指数, 电性距离矢量, 取代基指数, 热力学性质

碳化物形成对石墨烯生长的影响 65
王准准, 罗其全, 张文华, 李震宇* (中国科学技术大学合肥微尺度国家实验室, 合肥 230026)

摘要: 选取了一个典型的金属碳化物体系 Mo_2C 对其形成在石墨烯生长中的作用进行了基于第一性原理的理论研究. 碳在 Mo_2C 体相中扩散十分困难, 而在 $\text{Mo}_2\text{C}(001)$ 表面则变得比较容易. 因此抑制碳析出和表面石墨烯生长可以同时实现. 在 $\text{Mo}_2\text{C}(101)$ 表面碳扩散的难易程度依赖于扩散方向. 相对于(001)表面, (101)表面不利于石墨烯生长.

关键词: 碳化钼, 扩散, 密度泛函理论

高稳定电化学扫描隧道显微镜研制 70

夏志刚^{a,b}, 王季浩^{a,b}, 侯玉斌^a, 陆轻铀^{a,b*} (a. 中国科学院强磁场科学中心和中国科学技术大学, 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: 展示了一台自制的电化学扫描隧道显微镜. 这台电化学STM具有很高的稳定性, 它在XY平面和Z方向的漂移速率分别为每分钟67和55.6 pm/min. 另外, 特殊设计的扫描管部件有效地避免了在高湿度的环境中大漏电流的产生. 详细描述了这台电化学STM的机械结构. 通过在硫酸铜溶液中测量STM图像证明这套系统的优异性能, 得到了大范围干净有序的Au(111)表面和高分辨的高聚石墨原子图像.

关键词: 扫描隧道显微镜, 电化学, 高稳定

$\text{Tm}^{3+}/\text{Yb}^{3+}:\text{LiYF}_4$ 单晶的高效近红外量子剪裁及其在光伏电池中的应用 73

符立^a, 夏海平^{a*}, 董艳明^a, 李珊珊^a, 谷雪梅^a, 章践立^a, 王冬杰^a, 江浩川^b, 陈宝玖^c (a. 宁波大学光电功能材料重点实验室, 宁波 315211; b. 中国科学院宁波材料与技术工程研究所, 宁波 315211; c. 大连海事大学物理系, 大连 116026)

摘要: 采用改进的坩埚下降法成功地生长了 $\text{Tm}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$ 共掺氟化钇铽单晶. 该单晶体具有每吸收一个蓝色光子并能发射出2个1000 nm近红外光子的下转换发光效应. 测定了样品的激发光谱、发射光谱和荧光衰减曲线. 在465 nm蓝光激发下观察到由 $\text{Yb}^{3+}: ^2F_{5/2} \rightarrow ^2F_{7/2}$ 能级跃迁所致的960~1050 nm波段的发射带, 此发光带源于 Tm^{3+} 对 Yb^{3+} 离子的能量下转换过程. 应用Inokuti-Hirayama模型, 研究了晶体的能量转换过程, 结果表明 Tm^{3+} 向 Yb^{3+} 的能量传递是一个电偶极子相互作用机制过程. 当 Tm^{3+} 与 Yb^{3+} 离子的掺杂浓度为0.49mol%与5.99mol%时, 单晶的量子剪裁效率达到最大值167.5%.

关键词: 量子剪裁, 能量传递, LiYF_4 单晶, $\text{Tm}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$

铋纳米线中电导的温度依赖性 79

霍鹏程, 费广涛*, 张阳, 张立德 (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: 采用电沉积的方法在多孔氧化铝模板中合成了直径为30 nm且沿着[0112]方向生长的单晶铋纳米线, 测量了纳米线电导随着温度78~320 K变化的关系曲线. 结果发现, 其半金属半导体转变的温度为230 K, 且纳米线的电导有很强的温度依赖性.

关键词: 铋纳米线, 半金属半导体转变, 电导

分级多孔 $\text{CaFe}_2\text{O}_4/\text{C}$ 的合成及其微波催化活性 84

宋艺, 孔超, 李嘉* (济南大学材料科学与工程学院, 济南 250022)

摘要: 以天然木棉为模板, 利用造孔及纳米颗粒自组装两步法合成了分级多孔的 $\text{CaFe}_2\text{O}_4/\text{C}$ 复合催化剂. $\text{CaFe}_2\text{O}_4/\text{C}$ 复合催化剂保留了木棉模板的中空纤维形貌, 且该中空纤维是由碳及均匀分布在碳表面的 CaFe_2O_4 纳米颗粒组成. 该复合催化剂具有较强的甲基紫微波催化降解活性. 研究了 CaFe_2O_4 负载量、微波功率、催化剂用量、甲基紫的初始浓度和pH值对微波诱导甲基紫降解的影响. 结果表

明, $\text{CaFe}_2\text{O}_4/\text{C}$ 微波降解甲基紫的催化反应具有较高的反应速率和较短的反应时间. 其降解反应符合一级动力学模型. $\text{CaFe}_2\text{O}_4/\text{C}$ 高的催化活性得益于催化反应和吸附特性之间的协同作用.

关键词: 铁酸钙, 微波, 催化活性, 木棉, 降解

三芳胺和二氢吡啶作为给体的染料对钴电解质的染料敏化太阳能电池性能的影响 91

张月^a, 王志辉^b, 郝玉杰^b, 武全萍^a, 梁茂^b, 薛松^{b*} (a. 天津理工大学自动化学院控制理论与应用天津市重点实验室, 天津 300384; b. 天津理工大学化学化工学院, 天津 300384)

摘要: 合成了两种有机染料, 三芳胺染料 XS51 和二氢吡啶染料 XS52 , 并分别用于钴基电解质和碘基电解质的染料敏化太阳能电池中. 考察了染料结构对光物理性能、电化学性能和电池性能的影响. XS51 为含有四个己氧基的三芳胺结构, 表现出较好的空间位阻, 从而提高了光电压. XS52 中二氢吡啶的给电子能力强, 从而短路电流较大. 同碘电解质相比, 所合成的染料更适合用于钴电解质的染料敏化电池中. 在100 mW/cm²的光强下, 基于染料 XS52 的钴电解质太阳能电池总的光电转换效率达到6.58%.

关键词: 染料敏化太阳能电池, 二氢吡啶, 三芳胺, 光伏性能, 钴电解质

山梨醇水相催化重整制取芳香化合物 101

谈金^{a,b}, 王铁军^b, 龙金星^b, 张琦^b, 马隆龙^{a,b*}, 陈冠益^a (a. 天津大学环境科学与工程学院, 天津 300072; b. 中国科学院广州能源研究所可再生能源重点实验室, 广州 510640)

摘要: 研究了山梨醇水相催化重整对制备芳烃类化合物的调控规律. 研究表明, 芳烃类、酮类、呋喃类及有机酸类化合物为油相的主要成分. 当3%的镍负载在复合分子筛时, 芳烃收率达到了34.36%; 而当金属负载量达到20%时, 收率仅为4.82%. 同时, 不同的反应参数对收率也有较大的影响. 收率随着温度的升高逐渐增大; 但随着液时空速与氢气压力的增加而减小. 因此, 合适的温度、较长的滞留时间及较低的氢气压力有利于芳烃的生成.

关键词: 芳香化合物, 山梨醇, 水相催化重整, 复合催化剂

辐射接枝法制备膨化聚四氟乙烯杂化膜及其抗菌性表征 107

王运龙^a, 汪谟贞^{a*}, 吴启超^b, 周晓^b, 葛学武^a (a. 中国科学院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; b. 广东天安新材料股份有限公司, 佛山 528000)

摘要: 通过共辐射接枝的方法, 将聚丙烯酸成功接枝到膨化聚四氟乙烯薄膜上. 采用 NaBH_4 还原吸附在接枝链上的银离子, 在膜中原位负载银纳米粒子, 制备了抗菌性ePTFE杂化膜. 杂化膜的SEM、XPS、XRD和TGA表征结果表明, 负载的银纳米粒子粒径为几十纳米至100 nm. 而银纳米粒子的负载量可由聚丙烯酸的接枝率控制. 细菌平板计数法测试结果证明, 所制备的杂化膜具有优异的抗菌性, 对大肠杆菌的抗菌率高达100%.

关键词: 膨化聚四氟乙烯薄膜, 辐射接枝, 聚丙烯酸, 纳米银, 抗菌性

动态加载过程中石英玻璃诱导水的快速结晶相变 113

李永宏^{a,b*}, 张宁超^b, 王文鹏^b, 刘福生^b (a. 运城学院物理与电子工程系, 运城 044000; b. 西南交通大学高压科学与技术实验室, 成都 610031)

摘要: 在气炮加载试验中利用弹载光源原位测试技术, 观测了夹于石英玻璃之间的水在动态压缩过程中的透光特性. 通过其光透射特性研究了水的冲击相变. 实验结果发现液态水在动态冲击压缩过程中, 其压力低于2 GPa就出现透明性变差的现象, 而且水的透明性下降与石英玻璃的存在有关, 是一种石英诱导水的结晶相变现象.

关键词: 水, 石英玻璃, 冲击, 相变

北京机动车限行期间苯和甲苯的DOAS测量 119

李素文^{a,b}, 谢品华^b, 韦民红^a, 王江涛^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: 基于差分光学吸收光谱(DOAS)技术在北京机动车限行期间8月7日到28日对苯和甲苯进行连续监测, 获取苯、甲苯的变化特征, 分析交通排放苯、甲苯和车流量关系. 监测结果表明, 整个交通管制期间, 监测点苯与甲苯相关系数为0.8, 且二者比值为0.43~0.50, 充分证明苯系物具有同源性. 限行时段苯的浓度下降11.4%, 甲苯下降12.8%, 而车流量下降11.8%, 因此苯和甲苯是北京机动车排放的主要来源.

关键词: DOAS, 苯和甲苯, 机动车限行, 交通排放, 车流量