

## Chinese Abstracts (中文摘要)

**基于光声效应的深层组织选键成像** ..... 375  
惠杰<sup>a</sup>, 程继新<sup>b\*</sup> (a. 美国普渡大学物理系, 印第安纳州; b. 美国普渡大学生物医学工程系及化学系, 印第安纳州)

**摘要:** 基于分子振动吸收的光声成像技术为生物组织的化学成像提供了一个新的平台. 该技术在脊髓损伤、肿瘤、及心血管疾病的检测方面有广泛的应用前景. 本文综述该技术的发展历史及其在生物医学中的应用.

**关键词:** 非标记检测, 振动光谱, 化学成像

**甲醇分子在金红石TiO<sub>2</sub>(110)和锐钛矿TiO<sub>2</sub>(001)表面吸附和反应的活性位点** ..... 383

谭世惊, 王兵\* (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)

**摘要:** 通过高分辨的扫描隧道显微术研究并比较了金红石型TiO<sub>2</sub>(110)-(1×1)和锐钛矿型TiO<sub>2</sub>(001)-(1×4)两种表面的活性位点. 在金红石型TiO<sub>2</sub>(110)-(1×1)表面, 观察到氧空位缺陷是O<sub>2</sub>和CO<sub>2</sub>分子的活性吸附位点, 而五配位的Ti原子是水分子和甲醇分子的光催化反应活性位点. 在锐钛矿型TiO<sub>2</sub>(001)-(1×4)表面, 观察到完全氧化的表面, Ti原子更可能是六配位的, H<sub>2</sub>O和O<sub>2</sub>分子均不易在这些Ti原子上吸附. 经还原后表面出现富Ti的缺陷位点, 这些缺陷位点对H<sub>2</sub>O和O<sub>2</sub>分子表现出明显的活性. 锐钛矿型TiO<sub>2</sub>(001)-(1×4)表面的吸附和反应活性并不具有很高的活性, 某种程度上其表现出的活性似乎低于金红石型TiO<sub>2</sub>(110)-(1×1)表面.

**关键词:** 金红石型二氧化钛, 锐钛矿型二氧化钛, 催化和光催化, 扫描隧道显微术

**不同初始振动态下D<sub>2</sub>O在B带的态-态光解动力学** ..... 396

韩山雨<sup>a</sup>, 周林森<sup>a</sup>, 谢代前<sup>a,b\*</sup> (a. 南京大学化学化工学院理论与计算化学研究所, 教育部介观化学重点实验室, 南京 210093; b. 中国科学技术大学量子信息与量子科技前沿协同创新中心, 合肥 230026)

**摘要:** 利用高精度的非绝热从头算势能面, 采用量子实波包方法研究了D<sub>2</sub>O在3个不同初始振动态(0,1,0)、(1,0,0)和(0,0,1)下光激发到B̄态解离过程的态-态量子动力学. 结果表明, 由于初始振动波函数的形状不同, 从不同振动态产生的吸收光谱、产物分布和产物分支比具有不同的动力学特性. 弯曲振动态(010)的吸收谱呈现出两波瓣的形状且中间具有较浅的极小值, 其基态产物OD(X̄)在高能量区域会出现轻微的振动态反转现象. 所有初始振动态得到的激发态产物OD(Ā)的振-转态分布都随能量的变化出现强烈的震荡, 这是由于受到了激发态势能面上长寿命共振态的影响. 反对称伸缩振动态(0,0,1)在高能量区域具有较大的产物分支比OD(Ā)/OD(X̄), 表明绝热通道在某些情形下是主要的解离通道.

**关键词:** 光解, 重水, 振动激发态, 锥形交叉, 量子动力学

**O(<sup>1</sup>D)和CD<sub>4</sub>反应的准经典轨线** ..... 403

邵科杰, 傅碧娜\*, 张东辉\* (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, 理论和计算化学中心, 大连 116023)

**摘要:** 在新的全域势能面上, 用准经典轨线方法细致地研究了O(<sup>1</sup>D)+CD<sub>4</sub>多通道化学反应的动力学. 这个势能面是用交换不变多项式方法基于MRC+Q/aug-cc-pVTZ从头算拟合得到的. 通过计算得到了产物OD+CD<sub>3</sub>、D+CD<sub>2</sub>OD/CD<sub>3</sub>O和D<sub>2</sub>+DCOD/D<sub>2</sub>CO的分支比、平动能分布以及角度分布, 结果显示理论与实验吻合得较好, 从而说明了这个反应的同位素取代效应很小. 研究表明, O(<sup>1</sup>D)+CD<sub>4</sub>反应是经过陷入的抽取机理发生的: 最初主要通过D原子的抽取, 并不是之前人们认为的直接C-D键的插入形成CD<sub>3</sub>OD中间物后再进而解离成各个产物通道.

**关键词:** 多通道反应, 反应动力学, 准经典轨线, 势能面

**耗散子运动方程组的可控截断** ..... 409

孔源<sup>a</sup>, 张厚道<sup>b\*</sup>, 王铁萌<sup>a</sup>, 徐瑞雪<sup>a,c\*</sup>, 严以京<sup>a,b</sup> (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. 香港科技大学化学系, 香港; c. 中国科学技术大学量子信息和量子物理协同创新中心, 合肥 230026)

**摘要:** 为耗散子运动方程组提出精度可控的预截断方案来模拟和研究非微扰的量子耗散动力学. 发展了具有类似Caldeira-Leggett主方程

形式、在终止阶层采取马尔科夫和高温近似方法的截断方案, 根据马尔科夫性质的分析给出确定终止层数的精度判断, 并通过电荷转移体系的动力学模拟进行了检验.

**关键词:** 耗散子, 运动方程组, 可控截断

**使用态-态分辨的量子波包方法对Li+HF/DF反应的研究** ... 415

李文涛<sup>a,b</sup>, 陈茂笃<sup>a</sup>, 孙志刚<sup>b\*</sup> (a. 大连理工大学物理与光电工程学院, 大连 116024; 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)

**摘要:** 使用基于反应物坐标的含时量子波包方法, 在APW势能面上, 计算了碰撞能在0~0.25 eV范围的Li+HF/DF(*v*=0, *j*=0, 1)反应的积分和微分截面. 同时也计算了初始态选择的反应速率常数. 计算结果表明, Li+DF和Li+HF反应产物分布基本类似, 只是前者产物转动激发态稍微多些. 反应物的转动激发对于Li+DF反应影响很小. 这两个反应的微分截面都是前向散射为主的, 特别是在碰撞能较高时候. 产物振转态分辨的积分截面和后向散射随碰撞能而呈现的振荡现象, 可以用来指认Li+HF反应中的共振态. Li+HF的反应速率常数在100~300 K几乎不变, 而Li+DF的反应速率常数则增长了10倍左右. Li+HF的反应几率和积分截面和以前报道的结果总体符合较好, 差别应该是计算收敛性更好所致.

**关键词:** 量子波包方法, Li+HF/DF, 速率常数, 同位素

**二阶量子路径的相干控制** ..... 426

高放<sup>a</sup>, 王耀雄<sup>a,b</sup>, 操德文<sup>a,b</sup>, 双丰<sup>a,b\*</sup> (中国科学院合肥智能机械研究所, 合肥 230027; b. 中国科学技术大学自动化系, 合肥 230027)

**摘要:** 研究了有*N*个中间能级连接初态和目标态的情况下量子路径的控制策略. 以*N*=3的量子体系为例, 详细阐述了针对弱的宽频场的4*N*分块控制方案, 其中分块的边界频率依赖于量子体系的共振频率. 此策略利用了路径幅度中共振和非共振的相干效应, 可通过只调节2*N*个相位变量实现.

**关键词:** 相干控制, 二阶, 量子路径

**光合作用体系捕光复合物线性和非线性光谱的理论研究: 修正的Redfield方法的验证** ..... 431

景圆圆, 宋凯, 白书明, 史强\* (中国科学院化学研究所分子反应动力学国家重点实验室, 北京分子科学国家实验室, 北京 100190)

**摘要:** 使用数值精确的级联方程方法对其计算可靠性进行了验证. 目前已知, 修正的Redfield方法所用的微扰和马尔科夫近似, 在中间耦合区对激发态能量转移会给出不正确的描述. 因此研究其在计算各种光谱信号时是否仍然有效有重要意义. 利用不同参数下的二聚体模型和Fenna-Matthews-Olson复合物模型, 使用级联方程方法和修正的Redfield方法, 计算并比较了它们的吸收谱、发射谱和二维电子相干光谱. 研究发现在较大的参数范围内两种方法给出一致的结果, 这两种方法的对比也增进了对光合作用捕光复合物的2D光谱中量子拍频信号来源的认识.

**关键词:** 光合作用体系, 捕光复合物, 光谱, 修正的Redfield方法

**基于光腔衰荡光谱的宽范围水汽探测** ..... 440

陈兵<sup>a</sup>, 王进<sup>a</sup>, 孙羽<sup>a</sup>, 康鹏<sup>a</sup>, 刘安雯<sup>a</sup>, 李建英<sup>b</sup>, 贺晓雷<sup>b</sup>, 胡水明<sup>a\*</sup> (a. 中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室, 能源材料化学协同创新中心, 合肥 230026; b. 中国气象局气象探测中心, 北京 100081)

**摘要:** 介绍基于光腔衰荡光谱技术的光学湿度测量装置. 该装置具有高真空兼容性, 衰荡腔由低膨胀的殷钢制成, 并利用其自身的自由光谱范围实现光谱的自标定. 使用单个在1.39 μm的半导体激光器, 实现了从真空、高纯氮气中痕量水汽, 一直到大气湿度的测量, 可测量的水汽分压范围极大: 0.1 μPa~1 kPa. 该光学湿度计可用于作为基本水汽标准, 以及测定低温下水(冰)的蒸气压.

**关键词:** 光腔衰荡光谱, 水汽, 痕量探测, 红外吸收

**用激光计数放射性氦原子** ..... 445

杨国民<sup>a</sup>, 涂乐义<sup>a</sup>, 程存峰<sup>a</sup>, 张向阳<sup>a,b</sup>, 胡水明<sup>a\*</sup> (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. 中国地质科学院水文地质环境地质研究所, 石家庄 050061)

**摘要:** 原子阱痕量分析是一种基于激光的新方法, 能够对数微升氦气中丰度低至 $10^{-14}$ 的 $^{85}\text{Kr}$ 和 $^{81}\text{Kr}$ 原子进行计数测量. 介绍了在合肥建成的痕量放射性氦同位素测量系统, 包括ATTA装置、水中溶解气提取和氦气分离提纯的样品处理设备. 利用该系统对国内多处大气中 $^{85}\text{Kr}$ 浓度的测量结果为 $1.3\sim 1.6\text{ Bq/m}^3$ , 与文献中北半球大气本底值相吻合. 对华南和华北的几个浅层和深层地下水样品进行了 $^{85}\text{Kr}$ 和 $^{81}\text{Kr}$ 测年, 示范了该系统的应用.

**关键词:** 原子阱痕量分析,  $^{85}\text{Kr}$ ,  $^{81}\text{Kr}$ , 地下水, 测年

#### ZrO<sup>-</sup>双原子阴离子的光电子成像谱 ..... 452

刘清宇<sup>a</sup>, 胡连瑞<sup>b</sup>, 陈辉<sup>b\*</sup>, 何圣贵<sup>a\*</sup> (a. 中国科学院化学研究所分子动态与稳态结构实验室, 北京分子科学国家实验室, 北京 100190; b. 中国科学院化学研究所光化学实验室, 北京分子科学国家实验室, 北京 100190)

**摘要:** 利用激光溅射制备了ZrO<sup>-</sup>双原子阴离子, 测量了其光电子成像谱. 实验观测到的光电子能谱可以在光学光谱和高精度从头计算的基础上得到很好的归属. ZrO<sup>-</sup>的基态确定为 $^2\Delta$ 态, 其自旋-轨道分裂能为 $578\pm 12\text{ cm}^{-1}$ , ZrO的电子亲和能测定为 $1.249\pm 0.005\text{ eV}$ . 第一次在实验上观测到ZrO的 $c^3\Sigma^-$ 激发态, 其相对于 $X^1\Sigma^+$ 基态的能量为 $13316\pm 24\text{ cm}^{-1}$ , 同时还对ZrO与其等电子体NbN的电子结构进行了比较.

**关键词:** 双原子分子, 电子结构, 自旋-轨道分裂, 光电子成像谱, 从头算

#### 甲醇在TiO<sub>2</sub>(110)表面光催化氧化的波长相关性 ..... 459

王志强, 郝群庆, 周传耀\*, 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:** 用程序升温脱附的方法研究了甲醇在TiO<sub>2</sub>(110)表面光催化氧化的波长相关性. 对于不同波长的激发光, 甲醇光催化解离的产物相似, 都是在光照的过程中通过O-H键和C-H键的断裂形成甲醛, 解离出的氢原子转移到相邻的两配位的桥氧原子(O<sub>b</sub>)上形成O<sub>b</sub>H. 但是反应速率与激发光波长强烈相关. 在360 nm光照下, 甲醇的反应速率是400 nm光照时的4.8倍. 这与以前使用时间分辨的飞秒激光吸收光谱测量的结果是一致的, 他们认为近带隙激发和过带隙激发产生的电荷相比, 前者的复合速率要远快于后者.

**关键词:** 二氧化钛, 光催化, 波长相关性, 程序升温脱附谱

#### 直接观测乙醇分子在TiO<sub>2</sub>(110)面的光催化过程 ..... 465

卫东, 金闲驰, 戴东旭, 马志博\*, 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:** 利用扫描隧道显微镜研究了在低温(80 K)下乙醇分子在TiO<sub>2</sub>(110)面的光解离过程. 在这种温度下, 大部分乙醇分子都以分子吸附的形式吸附在表面五配位钛位. 在紫外光照射之后, 乙醇发生了光解离, 两种不同的产物特征被探测到. 使用针尖操控技术对其中一种产物特征进行了详细的分析, 成功了解了它的构成, 中间一个五配位钛位吸附的乙醛分子加上位于左右两个不同氧列的羟基构成了这种产物. 接着实施了多次光照实验来进一步研究乙醇两种光解离产物特征之间的联系.

**关键词:** 二氧化钛, 扫描隧道显微镜, 乙醇, 光催化

#### 反应物转动激发对F+H<sub>2</sub>→HF+H体系反应动力学的影响 .... 471

杨天罡<sup>a,b</sup>, 黄龙<sup>b</sup>, 谢雨润<sup>b</sup>, 汪涛<sup>b,c,d</sup>, 肖春雷<sup>b</sup>, 孙志刚<sup>b,c\*</sup>, 戴东旭<sup>b</sup>, 陈茂笃<sup>a\*</sup>, 张东辉<sup>b,c</sup>, 杨学明<sup>b,c\*</sup> (a. 大连理工大学物理与光电工程学院, 大连 116024; 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. 中国科学技术大学量子信息和量子科技前沿协同创新中心, 合肥 230026; d. 中国科学技术大学化学物理系, 合肥 230026)

**摘要:** 利用高分辨的交叉分子束装置研究了F+H<sub>2</sub>( $v=0, j=0, 1$ )反应在碰撞能 $1.27\text{ kcal/mol}$ 下的动力学行为, 获得了产物HF( $v'=1, 2, 3$ )转动态分辨的微分散射截面. 当反应物H<sub>2</sub>处于不同转动量子态 $j=0$ 和 $1$ 时, 产物HF( $v'=2$ )的散射角分布都主要表现为后向散射, 但HF( $v'=2$ )的转动态布居与反应物的转动量子态密切相关, 转动激发的H<sub>2</sub>分子将产生转动“更热”的HF( $v'=2$ )产物. 另外, 对于HF( $v'=3$ )产物通道, 由于slow-down机理的影响, 当H<sub>2</sub>布居于 $j=0$ 时前向散射表现更显著.

**关键词:** 交叉分子束, 里德堡态标识, 微分散射截面

#### Ag<sub>4</sub>超原子在超原子分子中的SP<sup>3</sup>杂化特性 ..... 476

闫丽娟<sup>a</sup>, 程龙玖<sup>b\*</sup>, 杨金龙<sup>a,c\*</sup> (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. 安徽大学化学系, 合肥 230601; c. 中国科学技术大学量子信息和量子科技前沿协同创新中心, 合肥 230026)

**摘要:** 为了研究和原子类似的超原子也能用来构建分子和材料的这一特性, 以正四面体的Ag<sub>4</sub>团簇为例构建了一系列的超原子分子Ag<sub>4</sub>X<sub>4</sub>(X=H, Li, Na, K, Cu, Ag, Au以及F, Cl, Br). 基于超级价键模型, 可以将正四面体的Ag<sub>4</sub>团簇视为4电子的超原子, 通过比较Ag<sub>4</sub>和C组成的代表分子Ag<sub>4</sub>X<sub>4</sub>(X=Au, Cl)和CX<sub>4</sub>(X=H, Cl)的成键模式和分子轨道, 可以发现Ag<sub>4</sub>超原子与sp<sup>3</sup>杂化的C原子相似. 能量计算显示超原子分子是稳定的, 大能隙和高芳香性也进一步证实了它们的稳定性.

**关键词:** 超原子, 幻数, 超级价键, 束缚能, 芳香性

#### 内嵌金属富勒烯Tc<sub>n</sub>和Tc<sub>n</sub>@C<sub>70</sub>的理论研究 ..... 481

曾丽金, 邓珂\* (中国科学院国家纳米科学中心纳米标准与检测重点实验室, 北京 100190)

**摘要:** 系统地研究了内嵌金属富勒烯Tc<sub>n</sub>和Tc<sub>n</sub>@C<sub>70</sub>的平衡态结构、电子和磁性性质. 研究表明C<sub>70</sub>能够内嵌Tc<sub>n</sub>团簇( $n\leq 9$ ). 除了Tc<sub>2</sub>团簇, 当 $n\leq 5$ 时, 形成内嵌金属富勒烯Tc<sub>n</sub>@C<sub>70</sub>是放热的过程, 而当 $n>5$ 时, 这种过程是吸热的. 在内嵌过程中, Tc<sub>n</sub>团簇的构型和电子结构都发生了相当大的变化. 与单独的Tc<sub>n</sub>团簇相比, Tc<sub>n</sub>@C<sub>70</sub>的总磁矩明显地降低. 对体系的轨道分布, Hirshfeld分布和态密度进行了分析发现, 在内嵌金属富勒烯体系里, 电子可以通过Tc-C的有效杂化从Tc<sub>n</sub>团簇向碳笼转移, 从而使得体系的整体磁性降低.

**关键词:** 密度泛函理论, 内嵌金属富勒烯, Tc<sub>n</sub>@C<sub>70</sub>

#### 液氮滴对双原子分子质谱的作用: 抑制解离反应 ..... 489

Andrew M. Ellis, 杨生福\* (英国莱斯特大学化学系纳米化学实验室)

**摘要:** 使用电子冲击的方法电离液氮纳米滴中添加的分子通常首先产生一个氢离子, 随后这个氢离子在遇到其他分子之后将电荷转移到分子上, 并将该分子电离. 为了明确在该过程中, 在分子周围的液氮纳米滴对该分子解离反应的影响和液氮纳米滴对电荷转移反应的作用, 测量了在液氮纳米滴中分别加入氧气、氮气和一氧化碳的质谱. 结果表明, 液氮纳米滴几乎完全抑制了解离反应的发生.

**关键词:** 液氮纳米滴, 电子冲击, 电荷转, 移解离反应

#### 光诱导噻吨酮与二苯胺间电子转移反应的溶剂化效应 ..... 493

陈琳, 周巧慧, 刘香, 周晓国\*, 刘世林 (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:** 利用纳秒激光闪光光谱技术研究了噻吨酮(TX)和二苯胺(DPA)的光学反应. 在355 nm光激发下, TX的基电子态跃迁至第一激发态进而通过系间窜越生成三重态 $^3\text{TX}^*$ . 在乙腈/水混合溶剂中,  $^3\text{TX}^*$ 与DPA反应体系的瞬态吸收光谱呈现出四个谱峰, 分别对应 $^3\text{TX}^*$ 、TXH<sup>+</sup>、TX<sup>-</sup>和DPA<sup>+</sup>的吸收. 随着溶剂极性的增大, 这些吸收峰均发生红移. 结合动力学测量,  $^3\text{TX}^*$ 与DPA的反应机理被证实为电子转移伴随质子转移过程.  $^3\text{TX}^*$ 与DPA反应的猝灭速率常数随溶剂极性的增大而缓慢减小,  $9.7\times 10^9\text{ L}/(\text{mol}\cdot\text{s})$ (纯乙腈)、 $8.7\times 10^9\text{ L}/(\text{mol}\cdot\text{s})$ (乙腈:水=9:1)、 $8.0\times 10^9\text{ L}/(\text{mol}\cdot\text{s})$ (乙腈:水=4:1)和 $7.5\times 10^9\text{ L}/(\text{mol}\cdot\text{s})$ (乙腈:水=1:1). 质子溶剂-水在此反应中的作用不明显, 溶剂的极性对 $^3\text{TX}^*$ 与DPA电子转移速率的影响不大, 表明 $^3\text{TX}^*$ 的 $^3n\pi^*$ 和 $^3\pi\pi^*$ 三重态吸引DPA中电子的能力较强.

**关键词:** 电子转移, 质子化, 反应机理, 吸收光谱, 激光闪光光谱

#### 二氧化碳对质子化甲醇的溶剂化作用 ..... 501

赵志<sup>a,b</sup>, 孔祥涛<sup>b</sup>, 雷鑫<sup>b</sup>, 张冰冰<sup>b,c</sup>, 赵纪军<sup>a</sup>, 江凌<sup>b\*</sup> (a. 大连理工大学三束材料改性教育部重点实验室, 大连 116024; 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, 能源材料化学协同创新中心, 大连 116023; c. 大连理工大学精细化工国家重点实验室, 大连 116024)

**摘要:** 利用团簇模型研究了二氧化碳对质子化甲醇的溶剂化作用. H<sup>+</sup>(CH<sub>3</sub>OH)(CO<sub>2</sub>)<sub>n</sub><sup>+</sup>( $n=1\sim 7$ )的量子化学计算结果表明, 需要3个或4个二氧化碳分子完成甲醇的羟基第一溶剂层. 除了氢键, 二氧化碳分子间的相互作用对大团簇的稳定性也起到了重要的作用. 在这些溶剂化作用的早期阶段, 不容易发生质子从甲醇到二氧化碳的转移过程. 模拟的红外光谱揭示了自由O-H伸缩振动、氢键作用后的O-H伸缩振动、以及二氧化碳的O-C-O伸缩振动频率是研究质

子化甲醇溶剂化过程的灵敏探针.

**关键词:** 甲醇, 二氧化碳, 溶剂化, 红外光解离光谱, 量子化学计算

### 二维电子光谱仪器研制与指标分析 ..... 509

岳帅, 王专, 何小川, 朱刚贝, 翁羽翔\* (中国科学院物理研究所软物质物理院重点实验室, 北京 100190)

**摘要:** 介绍了一种利用光栅分光, 光子回波矩阵构型的二维光谱实验装置. 利用快速, 高灵敏度的EMCCD对信号进行外差单脉冲测量. 并对仪器的指标进行了检测, 30 min内12路相干光的相位抖动均方差达到 $\lambda/200$ , 19 min内染料IR140溶液外差回波信号的稳定性达到 $\lambda/90$ , 通过移动平移台测量了仪器的光谱准确性, 相移偏差均方差为 $\lambda/90$ , 对平移台移动不均匀导致的光谱失真进行了数值模拟. 另外在位相调整时为解决样品泵浦探测信号有干涉的问题, 提出了相位移动的方法. 将散射信号扣除, 大大提高了位相调整的准确性. 对染料IR144溶液, 光合蛋白色素复合体B820的测量与文献一致.

**关键词:** 二维光谱, 相位稳定, 位相调整

### 磷酸钾缓冲溶液与模型细胞膜相互作用的和频光谱 ..... 518

杨未来, 田康振, 叶树集\* (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, 量子信息和量子物理协同创新中心, 合肥 230026)

**摘要:** 利用和频光谱技术详细研究了磷酸钾缓冲溶液与带负电荷的生物仿生膜( $d_{54}$ -DMPG磷脂双层膜)相互作用的实时过程. 通过监控 $CD_2$ 、 $CD_3$ 、磷脂分子头部的磷酸根以及羰基官能团的光谱信号随加入磷酸钾缓冲溶液的实时变化, 获得了磷脂双层膜分子结构的动力学变化. 结果表明 $K^+$ 能够结合到细胞膜上, 并且很快地引起了 $CD_2$ 、 $CD_3$ 、磷脂头部磷酸根以及羰基官能团信号的变化. 根据各官能团的和频信号响应, 磷酸钾缓冲溶液很可能是通过在双层膜中形成环形气孔来与磷脂双层膜发生作用. 该结果可以很好地解释磷酸钾缓冲溶液环境下的离子协助蛋白质的跨膜过程.

**关键词:** 和频光谱, 磷酸钾缓冲溶液, 磷脂双层膜, 环形气孔, 相互作用

### 太湖藻及模型化合物的分级热解 ..... 525

李林凌, 张蕊, 童冬梅, 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:** 以太湖藻为原料, 通过分级热解来制备生物油, 分别以棕榈酸、琼脂糖和蛋清粉模拟藻中的脂质、糖类和蛋白质, 研究了藻分级热解生物油中主要组分的来源及热解过程中三大组分之间的相互作用. 结果表明, 藻生物油中的烃类、十六酸及酯类均源自藻中脂质的热解, 藻中蛋白质热解主要生成酚类、吡啶类、吡咯类和小分子酸; 生物油中大部分的酰胺和腈类是脂质和蛋白质热解中间物相互作用的产物. 藻组分中脂质和糖类的热解主要发生在473~573 K, 而蛋白质的热解主要发生在523 K以上. 藻生物油中仅有少量的糖类直接热解产物, 可能是糖类热解产物在蛋白质热解产生的氨气等的作用下发生了聚合, 使473和523 K所得生物油中有相当量的寡聚物; 脂质与蛋白质的热解中间物相互作用生成了酰胺, 酰胺再脱水又生成了腈类; 而脂质与糖类之间相互作用不明显.

**关键词:** 分级热解, 太湖藻, 相互作用, 模型化合物

### 合成 $Pb(OH)_2/rGO$ 催化剂用于催化转化糖为乳酸 ..... 533

蒋振亚, 闫立峰\* (中国科学技术大学化学物理系, 能源材料化学协同创新中心, 合肥 230026)

**摘要:**  $Pb^{2+}$ 离子可以作为高效的催化剂用于降解糖为乳酸, 但是为了降低暴露 $Pb^{2+}$ 离子于环境中的风险, 最好的办法是把铅固定在一个固体催化剂上. 报道了一个简单的制备 $Pb(PbO_2)/rGO$ 复合固体催化剂的方法, 可以得到石墨烯负载的纳米铅催化剂, 铅颗粒的尺寸在2~5 nm. 获得的催化剂可以在水中用于降解葡萄糖、果糖甚至纤维素, 产物主要为乳酸. 对于果糖、乳酸的产率为58.7% (433 K, 2.5 MPa  $N_2$ ); 当直接使用纤维素为原料, 无额外酸、碱催化剂时, 乳酸的产率可以达到31.7%.

**关键词:** 氢氧化铅, 纳米粒子, 复合物, 催化剂, 乳酸