

## 研究简报

### 两种烷基碘化物分子理论研究及其发射谱测量

程丽; 申作春; 鲁建业; 高惠德; 吕志伟

哈尔滨工业大学光电子技术研究所, 哈尔滨 150001

#### 摘要:

利用密度泛函理论(DFT)的B3LYP方法, 对烷基碘化物分子C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>F<sub>3</sub>I和n-C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>F<sub>3</sub>I的C—I解离势能曲线进行了理论计算, 并采用B3LYP方法和MPn(n=2, 3, 4)方法精确计算了C—I键解离能. 解离能计算进行了零点振动能(ZPVE)校正, 并运用完全均衡校正法对基函数重叠误差(BSSE)进行校正. 利用微波放电激励方法, 对C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>F<sub>3</sub>I和n-C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>F<sub>3</sub>I的发射谱进行观测. 实验结果表明, 通过微波放电激励这两种分子, 均可产生1315 nm发射谱, 说明利用微波放电可使C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>F<sub>3</sub>I和n-C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>F<sub>3</sub>I分子的C—I键解离, 从而产生碘原子.

关键词: 烷基碘化物 解离能 微波放电激励 1315 nm发射谱

收稿日期 2005-12-30 修回日期 2006-03-01 网络版发布日期 2006-06-27

通讯作者: 程丽 Email: chengli0411@163.com

#### 本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(184KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 烷基碘化物

▶ 解离能

▶ 微波放电激励

▶ 1315 nm发射谱

本文作者相关文章

▶ 程丽

▶ 申作春

▶ 鲁建业

▶ 高惠德

▶ 吕志伟