

小尺寸V O⁺团簇的激光光解和密度泛函计算

Photodissociation and Density Functional Calculations of Small V O⁺ Clusters

摘要点击 261 全文点击 99 投稿时间: 2011-8-15 采用时间: 2011-9-22

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/05/572-579

中文关键词 [质谱](#) [质量选择](#) [光解](#) [钒氧团簇](#)

英文关键词 [Mass spectrometry](#) [Mass-selection](#) [Photodissociation](#) [Vanadium oxide cluster](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
李仁忠	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	
许洪光	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	
曹国进	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	
赵雨超	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	
郑卫军*	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	zhengwj@iccas.ac.cn

中文摘要

通过激光溅射法产生了V₂O⁺ (n=1, 2), V₃O⁺ (n=1, 2, 3)和V₄O₃⁺等缺氧的钒氧团簇, 并采用532和266 nm波长的激光对它们进行了光解研究. 利用密度泛函理论计算与激光光解实验相结合确定了这些团簇的几何结构和可能的光解通道. 激光光解实验表明V

英文摘要

Oxygen-poor vanadium oxide clusters, V₂O⁺ (n=1, 2), V₃O⁺ (n=1, 2, 3), and V₄O₃⁺, were produced by laser vaporization and were mass-selected and photodissociated with 532 and 266 nm photons. The geometric structures and possible dissociation channels of these clusters were determined based on the comparison of density functional calculations and photodissociation experiments. The experiments show that the dissociation of V₂O⁺, V₂O₂⁺, and V₃O₃⁺ mainly occurs by loss of VO, while the dissociation of V₃O⁺ and V₄O₃⁺ mainly occurs by loss of V atom. For the dissociation of V₃O₂⁺, the VO loss channel is slightly dominant compared to the V loss channel. The combination of experimental results and theoretical calculations suggests that the V loss channels of V₃O⁺ and V₄O₃⁺ are single photon processes at both 532 and 266 nm. The VO loss channels of V₂O₂⁺ and V₃O₃⁺ are multiple-photon processes at both 532 and 266 nm.

Copyright©2007 IOPP

承办: 中国科学技术大学 协办: 中国科学院大连化学物理研究所
主管: 中国科学技术协会 主办: 中国物理学会 国际代理发行: 英国物理学会

编辑部地址: 安徽省合肥市金寨路96号 中国科学技术大学东区外语楼二楼
联系电话: 0551-3601122 Email: cjcp@ustc.edu.cn

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计