

文章编号:1004-5929(2013)03-0322-07

7-(3,6-二硝基-N-p-乙炔基苯基吡啶)香豆素分子的光谱和 激发态的密度泛函理论研究

梁小蕊¹, 张 静³, 江炎兰¹, 王 刚^{2*}, 王秀娟², 赵 波⁴

- (1. 海军航空工程学院, 烟台 264001;
2. 中国科学院烟台海岸带研究所, 烟台 264003;
3. 山东省烟台市莱山区林业局, 烟台 264000;
4. 南京师范大学化学与材料科学学院, 南京 210046)

摘 要: 采用密度泛函理论(DFT)对 7-(3,6-二硝基-N-p-乙炔基苯基吡啶)香豆素分子做理论研究。用 B3LYP/6-31G(d, p) 对其几何结构进行优化, 得到其最稳定构型及能量。在优化结构的基础上, 对其进行频率分析得到了分子的红外光谱和拉曼光谱, 并对谱线中的各峰值做了具体指认, 同时也得到了分子的最高占据轨道(HOMO)和最低空轨道(LUMO)能隙为 2.150 eV。利用含时密度泛函理论(TDDFT)对该分子的激发态进行计算, 得到最低十个跃迁允许的单激发态。对前线分子轨道最高占据轨道和最低空轨道分析得到, C-C 原子之间形成了离域 π 键。研究结果表明: 7-(3,6-二硝基-N-p-乙炔基苯基吡啶)香豆素是一种良好的有机半导体材料, 并具有很好的发光性能。

关键词: 吡啶; 香豆素; 密度泛函理论(DFT); 红外光谱; 拉曼光谱; 激发态

中图分类号: O657, O641 文献标志码: A

DFT Study on Molecular Spectra and Excited State of 7-(4-(3,6-dinitro-carbazole-9-yl)styryl) Coumarin

LIANG Xiao-rui¹, ZHANG Jing³, JIANG Yan-lan¹, WANG Gang^{2*},
WANG Xiu-juan², ZHAO Bo⁴

- (1. *Naval Aeronautical and Astronautical University, Yantai 264001, China;*
2. *Yantai Institute of Coastal Zone Research, Chinese Academy of Sciences, Yantai 264003, China;*
3. *Laishan Forestry Bureau, Yantai 264000, China;*
4. *College of Chemistry and Material Science, Nanjing Normal University, Nanjing 210046, China)*

Abstract: The full geometry optimization of 7-(4-(3,6-dinitro-carbazole-9-yl)styryl) coumarin was performed using Density Functional Theory (DFT) method at B3LYP/6-311G(d, p) level of theory. Based on the optimized configuration the IR and Raman spectra of this molecule were obtained by the frequency analysis, and the peak position of the IR and Raman spectra were analysed by Gaussian View program. The HOMO-LUMO energy gap was gained as 2.150 eV simultaneously. The ten lowest allowable singlet excited states

收稿日期: 2012-07-16; 修改稿日期: 2012-08-30

基金项目: 中国科学院知识创新工程重要方向项目(kzcx2-yw-225); 烟台市科学技术发展计划项目(2010161)

作者简介: 梁小蕊(1979—), 女, 山东省烟台人, 讲师, 硕士, 主要从事量子化学及功能材料的研究工作。E-mail: xiaoruiliang12@yahoo.com.cn

通讯作者: 王刚(1980—), 男, 山东省烟台人, 中国科学院烟台海岸带研究所, 副研究员, 博士, 主要从事有机化学方面的研究工作。E-mail: gwang@yic.ac.cn

were studied by Time-dependent Density Functional Theory (TDDFT) method. The formation of π -delocalized bond was observed through the frontier molecular orbital of 7-(4-(3,6-dinitro-carbazole-9-yl)styryl) coumarin. The results showed that 7-(4-(3,6-dinitro-carbazole-9-yl)styryl) coumarin is a well organic semiconductor material and has perfect luminescence properties.

Key words: carbazole; coumarin; Density Functional Theory (DFT); infrared spectra; Raman spectra; excited state

1 引言

电致发光是一种直接将电能转换成光能的现象。有机电致发光技术较其他显示技术有其突出的优点,如功耗低、视角广、响应速度快、可大面积显示、并可与现有的多种标准、技术兼容制成成本低的发光器等,正是这些潜在优势,使有机电致发光技术的研究引起了国内外许多科研工作者的极大兴趣^[1-4]。在有机电致发光中,空穴和电子在高电场的作用下分别从阳极和阴极注入,在与发光层的交界面复合产生激子,激子经辐射跃迁而发光。因此,空穴传输材料都有强的给电子能力,在电子不间断地给出过程中表现出空穴的迁移特性,并且有高的空穴迁移率。大多数空穴传输材料为芳香多胺类^[5,6]、卟啉类^[7]及咪唑类^[8]化合物。

香豆素类化合物广泛分布于高等植物中,除具有较强的生理活性外,还具有较好的光、热稳定性,是很好的荧光增白剂、激光染料及非线性光学材料,并在分子器件方面具有独特的性能^[9,10]。同时,咪唑基团是典型的富电子基团,由于其特殊的刚性结构以及很容易在其分子的3、6、9位进行功能化修饰^[11],咪唑衍生物在电致发光领域常被用作具有高热稳定性的空穴传输材料^[12]。为探索这两种功能基组合后分子的性能变化,寻找性能优异的光学活性有机分子,本文设计了7-(3,6-二硝基-N-p-乙炔基苯基咪唑)香豆素分子,采用 Gaussian03 软件对其进行了详细的理论计算,包括基态和激发态的几何结构优化、红外光谱、拉曼光谱及最高占据轨道和最低空轨道(HOMO-LUMO)能隙,以期分子设计和相应器件的制备提供可靠的理论参考。

2 量子化学计算方法

7-(3,6-二硝基-N-p-乙炔基苯基咪唑)香豆

素分子的初始构型由 Gaussian View 软件构建形成。然后在 Gaussian03 程序中,利用密度泛函理论(Density Function Theory, DFT)方法在 B3LYP/6-31G(d, p)水平上对这种化合物分子的基态几何构型进行了全优化,并用单组态相互作用 CIS/6-31G(d, p)方法对最低激发态 S1 的构型进行全优化,得到分子基态和激发态的总能量及键长、键角、二面角等结构数据。在优化结构的基础上用同样的方法和基组计算了该分子振动频率,由计算结果可知,频率没有虚频,说明优化后为其稳定结构。通过频率计算得到了7-(3,6-二硝基-N-p-乙炔基苯基咪唑)香豆素分子的红外吸收光谱和拉曼散射光谱。以上述基态优化构型为基础,应用含时密度泛函理论(Time Dependent DFT, TDDFT)方法,采用 B3LYP/6-31G(d, p)基组对标题分子的激发态进行计算,得到了最低十个跃迁允许的单激发态。

3 结果与讨论

3.1 基态与激发态的几何构型

采用 DFT/B3LYP 方法在 6-31G(d, p)基组下对 7-(3,6-二硝基-N-p-乙炔基苯基咪唑)香豆素分子进行基态构型优化。所得到的立体结构、原子编号及笛卡尔坐标如图 1 所示。优化后的主要结构参数列于表 1 中,其中 r 代表键长, D 代表二面角。对 7-(3,6-二硝基-N-p-乙炔基苯基咪唑)香豆素分子进行频率分析得到其 3 个最小振动频率和强度分别为:9.76、13.26、20.83,3.123、0.108、2.490。从中可以看出,在其振动光谱中未出现虚频,说明优化得到的构型合理。

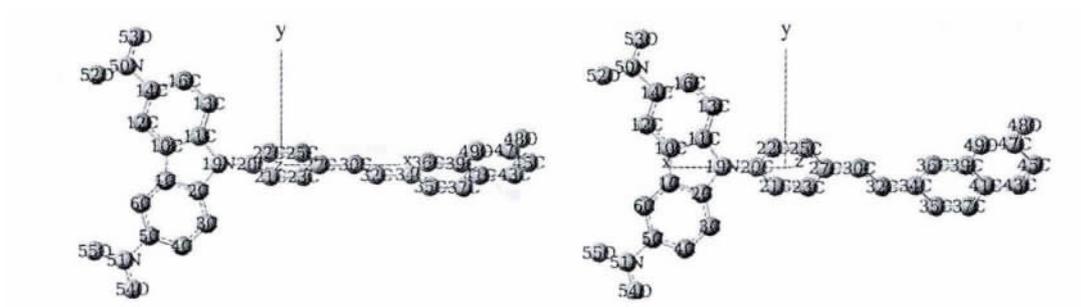


Fig. 1 The optimized structure in ground state (left) and excited state (right) of 7-(4-(3,6-dinitro-carbazol-9-yl)styryl) coumarin

Table 1 The optimized geometrical parameters in ground state and excited state of 7-(4-(3,6-dinitro-carbazol-9-yl)styryl) coumarin

键长(基态/激发态)/Å		键长(基态/激发态)/Å		二面角(基态/激发态)/°	
$r(1,2)$	1.424/1.420	$r(20,21)$	1.401/ 1.409	$D(4,5,51,55)$	179.55/179.33
$r(2,3)$	1.399/1.400	$r(20,22)$	1.398/ 1.412	$D(4,3,2,19)$	179.49/179.07
$r(3,4)$	1.389/1.388	$r(25,27)$	1.410/ 1.435	$D(3,2,19,11)$	-179.08/-178.06
$r(4,5)$	1.406/1.403	$r(23,27)$	1.411/ 1.435	$D(6,1,10,11)$	179.53/179.26
$r(5,6)$	1.394/ 1.391	$r(27,30)$	1.466/ 1.404	$D(12,14,50,53)$	179.79/179.82
$r(5,51)$	1.459/ 1.467	$r(30,32)$	1.349/ 1.445	$D(6,1,10,12)$	-0.99/-1.57
$r(1,6)$	1.392/1.393	$r(32,34)$	1.465/ 1.388	$D(13,11,19,20)$	0.71/1.80
$r(2,19)$	1.401/1.396	$r(34,35)$	1.418/ 1.449	$D(2,19,20,21)$	67.48/53.97
$r(1,10)$	1.452/1.448	$r(34,36)$	1.405/ 1.442	$D(11,19,20,22)$	67.60/54.12
$r(10,11)$	1.424/1.420	$r(37,41)$	1.408/ 1.430	$D(19,20,21,23)$	-179.80/-179.72
$r(11,19)$	1.401/1.396	$r(39,41)$	1.410/ 1.428	$D(21,23,27,30)$	-179.64/-179.80
$r(10,12)$	1.392/ 1.393	$r(41,43)$	1.441/ 1.416	$D(23,27,30,32)$	-0.45/-1.08
$r(11,13)$	1.399/1.400	$r(39,49)$	1.391/ 1.368	$D(30,32,34,35)$	-179.63/179.43
$r(12,14)$	1.394/ 1.391	$r(49,47)$	1.433/1.400	$D(36,39,49,47)$	-179.90/179.97
$r(14,16)$	1.406/ 1.404	$r(47,48)$	1.225/ 1.209	$D(39,49,47,48)$	179.92/-179.99
$r(14,50)$	1.459/ 1.467	$r(47,45)$	1.452/ 1.454	$D(49,47,45,43)$	0.03/0.01
$r(19,20)$	1.435/1.420	$r(45,43)$	1.355/ 1.369	$D(35,37,41,43)$	-179.96/-179.99

由图 1 可以看出 7-(3,6-二硝基-N-p-乙烯基苯基咪唑)香豆素分子具有 C1 对称性,其中咪唑基团与苯乙烯基不在同一平面上,二者之间有一定的二面角。观察表 1 中的二面角数据发现,除了 $D(2,19,20,21)$, $D(11,19,20,22)$ 两个角分别为 67.48° 和 67.60° 以外,其余二面角的绝对值均近似为 0° 或 180° ,这说明咪唑基团与两个硝基在同一平面上,而苯乙烯基和香豆素在

同一平面上。原子的共面性使得化学键可能存在共轭,从键长分析:标题化合物中 $r(1,2) = 1.424 \text{ \AA}$, $r(4,5) = 1.406 \text{ \AA}$,都比单个苯环中 C—C 键的键长 1.402 \AA 长,而 $r(2,3) = 1.399 \text{ \AA}$, $r(3,4) = 1.389 \text{ \AA}$, $r(5,6) = 1.394 \text{ \AA}$, $r(1,6) = 1.392 \text{ \AA}$,比单个苯环中 C—C 键的键长要短; $r(5,51) = 1.459 \text{ \AA}$, $r(14,50) = 1.459 \text{ \AA}$,比正常的 C—N 单键的键长 1.470 \AA 要短。这些数据

说明咪唑基团本身与两个硝基联合构成了较大共轭体系。同样的可以从表1数据看出标题分子中的苯乙烯基和香豆素中所有碳碳键长均介于C—C单键(1.540 Å)和C=C双键(1.340 Å)之间,这说明苯乙烯基和香豆素片段二者也形成了较大共轭体系,这样电子云能够在共轭环中自由运动,有利于电子的传输,增强了化合物的电子传输能力,这与其发光性质密切相关。

用CIS方法对标题化合物的最低激发态 S_1 的构型进行优化后的键长及二面角参数也在表1中给出。与基态一样,分子的激发态构型也具有 C_1 对称性。从表1中可以看出激发前后标题分子中的咪唑结构单元的键长几乎没有变化,而激发后连接咪唑与苯环的键长 $r(19,20)$ 和连接苯乙烯基与香豆素片段的键长 $r(27,30)$ 与 $r(32,34)$ 均较激发前显著降低,分别降低了0.015 Å、0.062 Å和0.077 Å。另外苯环C20—C21—C23—C27—C25—C22和C34—C35—C37—C41—C39—C36整体变大,这些变化主要是由电子跃迁的特征,特别是由最高占有分子轨道(HOMO)→最低空分子轨道(LUMO)($\pi \rightarrow \pi^*$)引起的。从表1的二面角数据来看激发后除了 $D(2,19,20,21)$ 和 $D(11,19,20,22)$ 有显著降低(分别降低了13.51°和13.48°)以外,其余各二面角变化不大。

3.2 红外光谱及归属

用DFT/B3LYP方法,6-31G基组计算得到的7-(3,6-二硝基-N-p-乙炔基苯基咪唑)香豆素分子基态时位于中红外区的红外谱图列于图2。红外光谱对应于分子的结构和化学键,本文利用Gaussian View程序结合萨特勒(Sadtler)红外光谱谱图数据库,对标题化合物的红外光谱进行了归属。振动频率在865 cm^{-1} 处的较弱吸收峰对应的是苯环的面内弯曲振动;1084 cm^{-1} 处的中等强度的吸收峰对应的是香豆素片段的C—H面内弯曲振动;1271 cm^{-1} 处的强吸收峰对应的是硝基的不对称伸缩振动;1493 cm^{-1} 处的较强吸收峰对应的是咪唑片段苯环上的C—H对称弯曲振动;1567 cm^{-1} 处的中等强度吸收峰对应的是香豆素片段上的碳碳不对称伸缩振动;1633 cm^{-1} 处的中等强度吸收峰对应的是咪唑片段上的碳碳不对称伸缩振动;1732 cm^{-1} 处的强吸收

峰是香豆素上的C=O伸缩振动;3204 cm^{-1} ~3260 cm^{-1} 处的较弱吸收峰是C—H的对称和不对称伸缩振动。分子的红外光谱起源于分子的振动基态与振动激发态之间的跃迁,只有在跃迁的过程中有偶极矩变化的跃迁才会出现红外光谱^[13,14]。以上数据表明,标题分子振动过程中偶极矩变化较大,红外活性振动强。

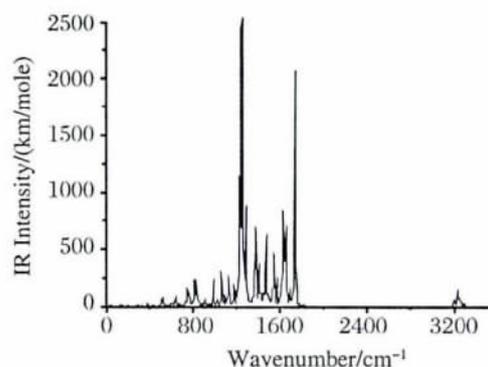


Fig. 2 Infrared spectra of 7-(4-(3,6-dinitro-carbazole-9-yl)styryl) coumarin

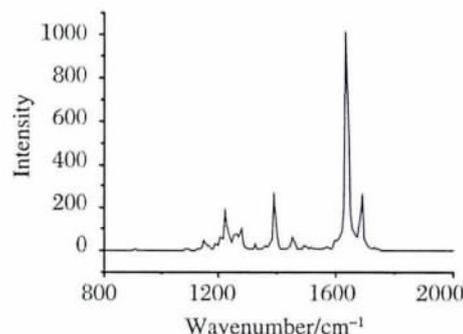


Fig. 3 Raman spectra of 7-(4-(3,6-dinitro-carbazole-9-yl)styryl) coumarin

3.3 拉曼光谱及归属

拉曼光谱起源于极化率 α 的变化,只有分子振动过程中极化率 α 有变化的振动模式在拉曼光谱中才能出现谱带。采用DFT/B3LYP方法,在6-31G基组水平上计算得到的7-(3,6-二硝基-N-p-乙炔基苯基咪唑)香豆素分子拉曼光谱列于图3中。各个拉曼散射谱峰的成因有所不同,其中1221.5 cm^{-1} 和1273.3 cm^{-1} 处的峰值可归因于苯环的C—H面内变形振动,1392.9 cm^{-1} 处的峰值是由咪唑的环伸缩产生的,1638.7 cm^{-1} 处的强峰是由苯环的C—C骨架伸

Table 2 The lowest ten transition allowed single-excitation state of the title compound

态	主要贡献	垂直激发能/eV	波长/nm	振子强度
1	HOMO-1→LUMO(-0.10332)	3.1055	399.24	0.0723
	HOMO→LUMO(0.69549)			
2	HOMO-1→LUMO+1(-0.13479)	3.2497	381.53	1.0696
	HOMO→LUMO+1(0.67825)			
	HOMO→LUMO+2(-0.10986)			
3	HOMO-7→LUMO(-0.15309)	3.3184	373.63	0.0003
	HOMO-7→LUMO+1(0.20512)			
	HOMO-7→LUMO+2(-0.36500)			
	HOMO-6→LUMO(0.51043)			
4	HOMO-6→LUMO+2(-0.14345)	3.3194	373.52	0.0029
	HOMO-7→LUMO(0.51375)			
	HOMO-7→LUMO+2(0.13888)			
	HOMO-6→LUMO(0.13956)			
	HOMO-6→LUMO+1(0.21253)			
5	HOMO-6→LUMO+2(-0.36753)	3.4253	361.97	0.2061
	HOMO-2→LUMO(-0.14304)			
	HOMO-1→LUMO+1(-0.12946)			
	HOMO→LUMO+2(0.66681)			
	HOMO-2→LUMO+2(0.10507)			
6	HOMO-1→LUMO(0.67439)	3.4425	360.16	0.1658
	HOMO→LUMO(0.11236)			
	HOMO-2→LUMO(0.61784)			
7	HOMO-1→LUMO+1(-0.24280)	3.5427	349.97	0.0382
	HOMO-1→LUMO+2(0.10483)			
	HOMO-1→LUMO+3(-0.13791)			
	HOMO→LUMO+2(0.10044)			
	HOMO-2→LUMO(0.18248)			
8	HOMO-1→LUMO+1(0.61344)	3.6449	340.16	0.1173
	HOMO-1→LUMO+2(0.12991)			
	HOMO→LUMO+1(0.12185)			
	HOMO→LUMO+2(0.14762)			
	HOMO-2→LUMO+1(0.49452)			
9	HOMO-2→LUMO+2(-0.47364)	3.7692	328.94	0.0664
	HOMO-1→LUMO(0.13268)			
	HOMO-2→LUMO(-0.11458)			
10	HOMO-1→LUMO+2(0.66393)	3.7825	327.79	0.0825
	HOMO-1→LUMO+3(0.10018)			

缩振动产生的, 1688.9 cm^{-1} 处的峰值可归于 C=C 伸缩振动。

3.4 分子的 HOMO-LUMO 能隙

HOMO 和 LUMO 间的能量差(即能隙)是电子激发过程所需的最低能量,是反映物质导电性和发光性质的一个重要参量。实验上一般采用垂直激发能估计 HOMO 到 LUMO 的能隙,认为最低单重激发态是 HOMO 到 LUMO 跃迁的贡献,而事实上 HOMO 到 LUMO 跃迁并不总是第一激发态的主要贡献,因此理论计算可以提供更可靠的信息。利用 DFT/B3LYP 方法在 6-311G(*d,p*) 基组下对 7-(3,6-二硝基-N-p-乙烯基苯基咪唑)香豆素分子进行结构优化,得到其 HOMO-LUMO 能隙为 2.150 eV ,这一结果表明 7-(3,6-二硝基-N-p-乙烯基苯基咪唑)香豆素有望成为一种良好的半导体。

3.5 激发态

采用含时密度泛函理论(TD-DFT)在 6-311G 基组水平上对 7-(3,6-二硝基-N-p-乙烯基苯基咪唑)香豆素分子进行激发态的计算,得到了该分子最低十个跃迁允许的激发态。其垂直

激发能、波长和振子强度见表 2。由表 2 数据可知,除第一和第二激发态光谱在紫光范围内,标题分子的其他激发态光谱均在紫外光范围内。激发态的能量主要集中在 $3.10\sim 3.78\text{ eV}$,振子强度是第二激发态较强,为 1.0696 ,其他各态振子强度较弱。第一激发态为自旋单重态,其波长为 399.24 nm ,振子强度为 0.0723 ,垂直激发能为 3.1055 eV 。它包含两种跃迁,分别为 HOMO-1 \rightarrow LUMO (-0.10332)和 HOMO \rightarrow LUMO(0.69549)。

图 4 给出了 7-(3,6-二硝基-N-p-乙烯基苯基咪唑)香豆素分子的基态和激发态的前线分子轨道图。比较可以看出基态的 HOMO 电子云主要分布在咪唑和与咪唑相邻的苯环上,LUMO 电子云则主要集中在苯乙烯基和香豆素片段上;激发态的 HOMO 电子云图与 LUMO 的基本一样,电子云几乎是均匀分布于整个分子的。HOMO 的电子云由 C-C 的 $\pi-\pi$ 轨道成分构成,LUMO 的电子云则由 C-C 的 $\pi-\pi^*$ 轨道成分构成。离域大 π 键的形成,增大了 π 电子的活动范围,使体系的能量降低,能隙变小,这就能够增加物质的导电性。

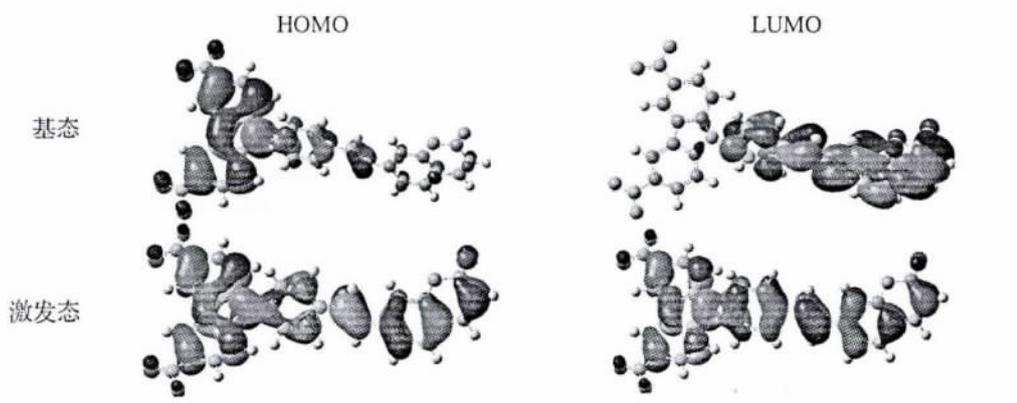


Fig. 4 Frontier molecular orbitals of 7-(4-(3,6-dinitro-carbazole-9-yl)styryl) coumarin

4 结论

利用量子化学密度泛函理论的 B3LYP/6-311G(*d*)方法以及单组态相互作用 CIS 方法,计算了 7-(3,6-二硝基-N-p-乙烯基苯基咪唑)香豆素分子的基态和激发态的稳定几何构型,同时得

到了基态和激发态的最低空轨道和最高占有轨道的电子云示意图及二者之间的能隙。在优化基态结构的基础上对该化合物进行频率分析,得到了红外光谱和拉曼光谱,并对谱线中的各峰值进行了具体指认。然后利用含时密度泛函理论对其激发态进行了计算,得到最低十个跃迁允许

的单激发态。对分子前线分子轨道 HOMO 和 LUMO 分析得到 C—C 原子之间形成离域键, 所有这些结果表明 7-(3, 6-二硝基-N-p-乙烯基苯基咪唑)香豆素有望成为一种良好的有机半导体材料, 并具有很好的发光特性, 目前, 量子化学计算已经成为科学研究的重要手段, 能够提供实验上无法获得的重要微观信息, 尤其在分子设计和机理解释等微观水平上发挥着越来越重要的作用, 为实验方法提供有力的理论依据和研究策略。本文的工作将为红外光谱和拉曼光谱的实际测试, 以及对了解器件中的光传播及相应器件的设计提供有力的技术参考。

参考文献:

- [1] Tang C W, Slyke S A. Organic electroluminescent diodes [J]. *Applied Physics Letters*, 1987, 51 (12): 913—915.
- [2] Jin Y, Kim S H, *et al.* Synthesis and Properties of PCPP-Based Conjugated Polymers Containing Pendant Carbazole Units for LEDs [J]. *Bulletin of Korean Chemical Society*, 2007, 28(12): 2419—2425.
- [3] Zhan X, Wang S, *et al.* New Series of Blue-Emitting and Electron-Transporting Copolymers Based on Cyanostilbene [J]. *Chemistry Materials*, 2003, 15(10): 1963—1969.
- [4] Baldo M A, Thompson M E, Forrest S H. High efficiency fluorescent organic light-emitting devices using a phosphorescent sensitizer [J]. *Nature*, 2000, 403: 750—753.
- [5] Junji K, Masato K, Katsutoshi N. Multilayer white light-emitting organic electroluminescent device [J]. *Science* 1995, 267(5202): 1332—1334.
- [6] Xie Z Y, Hung L S, Lee S T. High-efficiency red electroluminescence from a narrow recombination zone confined by an organic double hetero structure [J]. *Applied Physics Letters*, 2001, 79(7): 1048—1050.
- [7] Sakakibara Y, Okutsu S, Enokida T. Red electroluminescence and photoluminescence properties of a reduced porphyrin compound, tetraphenylchlorin [J]. *Thin Solid Films*, 2000, 363(122): 29—32.
- [8] Yang J X, Tao X T, Yuan C X, *et al.* A facile synthesis and properties of multi-carbazole molecules containing multiple vinylene bridges [J]. *Journal of American Chemical Society*, 2005, 127: 3278—3279.
- [9] 孙一峰, 宋化灿, 孙献忠, 等. 新型 3-取代-6-芳偶氮香豆素化合物的合成及结构表征 [J]. *有机化学*, 2003, 23 (2): 162—166. (Sun Yifeng, Song Huacan, Sun Xianzhong, *et al.* Synthesis and Structural Characterization of New 3-Substituted-6-arylazocoumarins [J]. *Chinese Journal of Organic Chemistry*, 2003, 23: 162—166.)
- [10] Hercuies D M. Fluoreacene and phosphorescence analysis [M]. New York: Interscience Publishers, 1996.
- [11] Zou Wu Xin, Yu Hai Tao, Guo Hui, *et al.* Syntheses and crystal structures of two new compounds containing triarylamine and benzoic hydrazide units [J]. *Chinese Journal of Structure Chemistry*, 2004, 23(2): 164—170.
- [12] 胥诗华, 刘望博, 何彦波, 等. 三种星形咪唑衍生物的合成及光电性能 [J]. *化学试剂*, 2010, 32(11): 965—969. (Xu Shigua, Liu Wangbo, He Yanbo, *et al.* Synthesis of three kinds of star-burst carbazole derivatives and their photoelectric performances [J]. *Chemical Reagents*, 2010, 32 (11): 965—969.)
- [13] 王庆学, 魏彦锋, 朱建妹, 等. B⁺注入 HgCdTe 外延材料的红外透射光谱分析 [J]. *光子学报*, 2005, 34(8): 1179—1182. (Wang Qingxue, Wei Yanfeng, Zhu Jianmei, *et al.* Infrared transmission spectroscopy of B⁺ implanted HgCdTe epilayers [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2005, 34 (8): 1179—1182.)
- [14] 林继鹏, 刘君华. 基于吸收峰混叠的红外混合气体分析方法的研究 [J]. *光子学报*, 2006, 35(3): 408—412. (Lin Jipeng, Liu Junhua. A new technology study on overlapped absorbed peak of infrared hybrid Gas [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2006, 35(3): 408—412.)