

光谱学与光谱分析

烟酸和烟酰胺及烟碱的太赫兹光谱研究

于 斌,黄 振,王晓燕,赵国忠

首都师范大学物理系,北京市太赫兹波谱与成像重点实验室,太赫兹光电子学学部共建教育部重点实验室,北京 100048

收稿日期 2008-8-26 修回日期 2008-11-28 网络版发布日期 2009-9-1

摘要 研究了室温条件下结构相似的烟酸和烟酰胺以及烟碱的太赫兹光谱。测量了它们的时间分辨光谱,通过傅里叶变换获得了它们的频谱,从而得到了频谱响应和折射率色散关系。实验结果表明,烟碱在太赫兹波段无明显的特征频谱响应,而烟酸和烟酰胺在太赫兹波段存在明显的特征频谱响应。用密度泛函理论(DFT)计算了烟酸和烟酰胺的太赫兹频谱,对它们的吸收峰产生的原因做了初步分析,认为烟酸吸收峰的产生是由于分子内部的扭转和摇摆所造成的,而烟酰胺的吸收峰(除1.93 THz以外)是由于分子间的相互作用和光声子模式而造成的。结果表明,数值模拟和实验结果相结合,可以用来分析烟酸和烟酰胺的分子结构和分子振动模式。

关键词 [太赫兹](#) [光谱](#) [烟酸](#) [烟酰胺](#) [密度泛函理论](#)

分类号 [O433.5](#)

DOI: [10.3964/j.issn.1000-0593\(2009\)09-2334-04](#)

通讯作者:

于 斌 paul3133515@126.com

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(1137KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

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](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“太赫兹”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [于 斌](#)

· [黄 振](#)

· [王晓燕](#)

· [赵国忠](#)