

β -D-吡喃半乳糖的太赫兹光谱研究

张同军^{1,2}, 蔡晋辉², 周泽魁²

1. 山东科技大学信息与电气工程学院, 山东 青岛 266510

2. 浙江大学控制科学与工程系, 浙江 杭州 310027

收稿日期 2006-11-10 修回日期 2007-2-20 网络版发布日期 2008-4-29

摘要 为深入了解 β -D-吡喃半乳糖在太赫兹波段的光谱特性, 利用太赫兹时域光谱技术测量了室温下 β -D-吡喃半乳糖晶体在0.3~3.0 THz范围内的吸收谱及折射率谱, 同时利用傅里叶变换红外光谱技术获得了半乳糖在1.5~19.5 THz之间的吸收谱。实验研究的同时, 运用密度泛函理论和6-311+G**基组计算了气态孤立 β -D-吡喃半乳糖分子的结构及其在太赫兹波段的振动频率, 并据此对实验光谱吸收峰进行了指认。研究表明, 除了因为分子间效应而导致的少许偏移外, 理论计算结果与实验数据吻合得很好; 实验光谱在6 THz以上频段的共振吸收峰来源于明确的分子内振动模式, 而6 THz以下低频段的共振吸收峰则主要来源于分子间氢键或晶体的声子模式。实验和理论研究的对比表明物质的远红外吸收特征对于分子的结构和空间排列非常敏感。

关键词 [\$\beta\$ -D-吡喃半乳糖](#) [太赫兹时域光谱](#) [傅里叶变换红外光谱](#) [密度泛函理论](#)

分类号 [O434.3](#)

DOI: [10.3964/j.issn.1000-0593.2008.04.001](#)

通讯作者:

张同军 suoptimal@163.com

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(1063KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“ \$\beta\$ -D-吡喃半乳糖”
的 相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [张同军](#)

· [蔡晋辉](#)

· [周泽魁](#)