

光谱学与光谱分析

胸腺嘧啶分子表面增强拉曼光谱的密度泛函理论和从头计算研究

陈善俊^{1, 2}, 陈艳¹, 周秀文², 罗炳池¹, 李喜波¹, 唐永建^{1*}, 孙卫国²

1. 中国工程物理研究院激光聚变研究中心, 四川 绵阳 621900

2. 四川大学原子与分子物理研究所, 四川 成都 610065

收稿日期 2011-9-20 修回日期 2011-11-30 网络版发布日期 2012-10-1

摘要 采用量子化学B3LYP(含电子相关效应的杂化密度泛函)方法和HF(Hartree-Fock, 哈特里-福克)方法, 在6-31+G^{**}(C, H, N, O)/LANL2DZ(Ag)水平上, 对TH(Thymine, 胸腺嘧啶)分子进行了几何结构优化, 计算了TH分子的NRS(normal Raman scattering, 常规拉曼散射)光谱和TH与Ag原子以及Ag₂团簇吸附的SERS(surface-enhanced Raman scattering, 表面增强拉曼散射)光谱, 并将两种理论方法计算的结果和实验值进行比较。结果表明: 对于NRS光谱, 采用DFT方法的计算结果比HF方法的计算结果更符合已有实验值; 而对于SERS光谱, 采用HF方法的计算结果更好。最后, 通过GaussView可视化软件, 对TH分子的振动频率进行了更为全面地归属。

关键词 [胸腺嘧啶](#) [表面增强拉曼散射](#) [密度泛函理论](#) [哈特里-福克方法](#) [频率归属](#)

分类号 [O657.3](#)

DOI: [10.3964/j.issn.1000-0593\(2012\)10-2698-04](#)

通讯作者:

唐永建 yj_tang2008@126.com

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(1282KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)

▶ [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“胸腺嘧啶”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

• [陈善俊](#)

•

• [陈艳](#)

• [周秀文](#)

• [罗炳池](#)

• [李喜波](#)

• [唐永建](#)

• [孙卫国](#)