

光谱学与光谱分析

双酚A拉曼光谱的密度泛函理论计算及表面增强拉曼光谱研究

汪仕韬<sup>1</sup>, 陆惠宗<sup>2</sup>, 马宁<sup>2</sup>, 鲍洋<sup>1</sup>, 汪何雅<sup>1</sup>, 刘志刚<sup>3</sup>, 姚卫蓉<sup>1\*</sup>

1. 江南大学食品学院, 江苏 无锡 214122
2. 欧普图斯(苏州)光学纳米科技有限公司, 江苏 苏州 215125
3. 江南大学机械工程学院, 江苏 无锡 214122

收稿日期 2010-7-22 修回日期 2010-11-1 网络版发布日期 2011-4-1

**摘要** 以密度泛函理论(DFT), RB3LYP/6-311G(d)方法计算得到的双酚A(BPA)分子振动光谱为依据, 对BPA分子常规拉曼光谱进行了详细的指认, 对其振动模式进行了归属。研究了BPA在金胶体系中的表面增强拉曼光谱, 对其吸附方式进行了分析: BPA分子在酸性pH下, 分子以CO<sup>-</sup>吸附到金溶胶上, —OH键的振动消失, 苯环以直立方式垂直于金胶上。

**关键词** [双酚A](#) [密度泛函理论](#) [表面增强拉曼光谱](#) [吸附](#)

分类号 [O657.3](#)

DOI: [10.3964/j.issn.1000-0593\(2011\)04-1006-04](#)

通讯作者:

姚卫蓉 [yaoweirongcn@jiangnan.edu.cn](mailto:yaoweirongcn@jiangnan.edu.cn)

#### 扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(1262KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)

▶ [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“双酚A”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [汪仕韬](#)

· [陆惠宗](#)

· [马宁](#)

· [鲍洋](#)

· [汪何雅](#)

· [刘志刚](#)

· [姚卫蓉](#)