

光谱学与光谱分析

### 对巯基苯胺分子表面增强拉曼光谱的密度泛函理论研究

陈艳<sup>1,2</sup>, 易早<sup>1,2</sup>, 陈善俊<sup>2</sup>, 罗江山<sup>2</sup>, 易有根<sup>1\*</sup>, 唐永建<sup>2</sup>

1. 中南大学物理科学与技术学院, 湖南 长沙 410083
2. 中国工程物理研究院激光聚变研究中心, 四川 绵阳 621900

收稿日期 2010-12-16 修回日期 2011-4-2 网络版发布日期 2011-11-1

**摘要** 采用密度泛函理论(density functional theory, DFT), 在B3LYP/6-31++G<sup>\*\*</sup>(C, H, N, S)/LANL2DZ(Ag)水平上, 对对巯基苯胺(p-aminothiophenol, PATP)分子进行了几何结构优化, 计算了PATP的常规拉曼散射(normal Raman scattering, NRS)光谱和PATP与Ag原子以及Ag<sub>2</sub>团簇吸附的表面增强拉曼散射(surface-enhanced Raman scattering, SERS)光谱, 并和其他文献值进行比较。计算表明, 计算结果与已有的实验值符合得较好, 采用PATP—Ag<sub>2</sub>吸附构型比PATP—Ag吸附构型的计算结果更符合已有实验值。最后, 通过GaussView可视化软件, 对PATP分子的振动频率进行了更为全面地归属。通过PATP分子SERS与NRS的比较, SERS在213 cm<sup>-1</sup>处观察到明显的Ag—S伸缩振动谱带, 可以说明PATP分子是通过形成Ag—S化学键吸附在银纳米粒子上的。该工作对理解和解释一些实验现象具有重要的指导意义, 同时也为研究PATP分子的SERS增强机理打下了基础。

**关键词** [对巯基苯胺](#) [表面增强拉曼散射](#) [密度泛函理论](#) [频率归属](#)

分类号 [O647.3](#)

DOI: [10.3964/j.issn.1000-0593\(2011\)11-2952-04](#)

**通讯作者:**

易有根 [yougenyi@163.com](mailto:yougenyi@163.com)

#### 扩展功能

##### 本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(1275KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)
- ▶ [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“对巯基苯胺”的相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [陈艳](#)
- [易早](#)
- [陈善俊](#)
- [罗江山](#)
- [易有根](#)
- [唐永建](#)