

光谱学与光谱分析

2-吡啶甲醇红外光谱的密度泛函理论研究

李晓明, 张来斌, 周留柱, 孔祥和*

曲阜师范大学物理工程学院, 山东 曲阜 273165

收稿日期 2012-2-23 修回日期 2012-5-26 网络版发布日期 2012-9-1

摘要 利用密度泛函理论(density functional theory, DFT) 在B3LYP/6-311G(d, p)水平上对2-吡啶甲醇分子进行了结构优化和频率计算, 得到了该分子的稳定构型和全部振动模式。通过与吡啶分子的结构参数以及相关文献数据的对比, 发现理论值与实验值相吻合。理论计算和实验测得的红外光谱数据的比较分析表明, 理论计算与实验测量结果符合得较好, 并对2-吡啶甲醇分子的振动模式进行了归属。

关键词 [红外光谱](#) [密度泛函理论](#) [2-吡啶甲醇](#)

分类号 [O657.3](#)

DOI: [10.3964/j.issn.1000-0593\(2012\)09-2358-04](#)

通讯作者:

孔祥和 xhkong@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“红外光谱”文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [李晓明](#)
- [张来斌](#)
- [周留柱](#)
- [孔祥和](#)