

光谱学与光谱分析

乙酰苯胺分子的拉曼、红外光谱和简正振动分析

梁会琴¹, 陶亚萍¹, 韩礼刚¹, 韩运侠¹, 莫育俊^{1, 2}

1. 洛阳师范学院物理与电子信息学院, 河南 洛阳 471022
2. 河南大学物理与电子学院, 光学与光电子技术研究所, 河南 开封 475004

收稿日期 2011-9-12 修回日期 2011-11-16 网络版发布日期 2012-10-1

摘要 分别在 $3\ 500\sim 50$ 和 $3\ 500\sim 600\ \text{cm}^{-1}$ 范围内实验测量了乙酰苯胺(ACN)分子的拉曼和红外光谱。运用密度泛函理论(DFT)采用B3LYP混合泛函和6-311G(d, p)基函数组, 计算了该分子的平衡构型和振动频率。结果表明: 理论计算的分子最优化构型参数与以往文献报道的实验数据吻合, 优于以往由6-31G(d)基函数组计算得到的参数; 理论计算的振动频率值和本实验的观测值吻合得较好。运用简正振动分析方法得到了ACN分子各振动频率的势能分布(PED), 对ACN分子的振动频率归属做出了全面、准确指认。

关键词 [乙酰苯胺](#) [拉曼和红外光谱](#) [简正振动分析](#) [频率归属](#)

分类号 [O657.3](#)

DOI: [10.3964/j.issn.1000-0593\(2012\)10-2706-04](#)

通讯作者:

梁会琴 huiqinliang@yeah.net

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
 - ▶ [PDF\(1254KB\)](#)
 - ▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)
 - ▶ [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“乙酰苯胺”的 相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [梁会琴](#)
- [陶亚萍](#)
- [韩礼刚](#)
- [韩运侠](#)
- [莫育俊](#)
-