

光谱学与光谱分析

胸腺嘧啶振动光谱的DFT理论研究及与实验结果的比较

尚治国, 白莹, 张燕珂, 莫育俊\*

河南大学物理与信息光电子学院, 河南 开封 475001

收稿日期 2005-5-8 修回日期 2005-8-16 网络版发布日期 2005-12-26

**摘要** 文章运用DFT(density functional theory, 密度泛函理论)计算了Th(Thymine, 胸腺嘧啶)的分子振动光谱, 计算时, 作者采用了B3LYP混合泛函和6-31G基函数组, 并对重原子和轻原子使用离散函数和极化函数; 考虑到胸腺嘧啶晶体粉末中每两个分子之间可能形成氢键, 作者加入两个水分子来模拟晶体内分子间氢键的影响。同时, 在实验上测量了胸腺嘧啶的拉曼光谱和红外光谱, 理论计算结果与实验结果基本一致, 结果表明, 同已报道的计算结果相比, 文章的计算结果总体上更接近实验值。通过理论和实验数据的比较分析, 对胸腺嘧啶的每个振动模式进行了归属。

**关键词** [密度泛函](#) [胸腺嘧啶](#) [拉曼光谱](#) [红外光谱](#)

**分类号** [O443](#)

**DOI:**

通讯作者:  
莫育俊

## 扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(350KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“密度泛函”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [尚治国](#)

· [白莹](#)

· [张燕珂](#)

· [莫育俊](#)