

# 1 - 萘酚的太赫兹光谱实验及理论研究

王利民, 朱立江, 孙延华

(国家能源集团 煤焦化有限责任公司, 乌海 016000)

**摘要:** 1-萘酚是煤化工产物萘的合成产物, 对环境和人体健康有危害. 采用太赫兹时域光谱 (THz-TDS) 技术, 获得了 1-萘酚在 0.5 ~ 4.0 THz 范围内的实测太赫兹吸收谱, 同时运用密度泛函理论 (DFT) 平面波赝势模型对 1-萘酚晶胞模型进行理论光谱计算, 探讨了平面波截断能在 800 ~ 1600 eV 范围内对理论光谱的影响, 并对吸收峰的振动模式进行了理论归属. 实验结果表明, 1-萘酚在 0.5 ~ 4.0 THz 范围内有 1.14 THz、1.60 THz、2.16 THz、2.81 THz、3.56 THz 共 5 个吸收峰, 平面波截断能 1400 eV 下得到的理论吸收谱与实测吸收谱在吸收峰个数、峰位、归一化峰强度上均有较好的一致性, 5 个吸收峰的振动模式均是以两元环为平面的受氢键束缚的面外摇摆振动或者面内扭转振动引起的. 这为太赫兹技术对 1-萘酚的识别提供了实验和理论基础, 具有一定的理论意义和实际应用价值.

**关键词:** 太赫兹; 密度泛函理论 (DFT); 理论光谱; 1-萘酚

中图分类号: O433.5

文献标志码: A

DOI: 10.19855/j.1000-0364.2025.041006

## Experimental and theoretical study of terahertz spectroscopy of 1 - naphthol

WANG Li-Min, ZHU Li-Jiang, SUN Yan-Hua

(National Energy Group Coal Coking Co., Ltd., Wuhai 016000, China)

**Abstract:** 1-naphthol is a synthetic product of the coal chemical product naphthalene, which is harmful to the environment and human health. The experimental terahertz absorption spectrum of 1-naphthol in the range of 0.5 ~ 4.0 THz was obtained by using terahertz time-domain spectroscopy (THz-TDS) technique. Meanwhile, the theoretical spectra of 1-naphthol cell model were calculated by using density functional theory (DFT) plane wave pseudopotential model. The influence of plane wave cutoff energy on the theoretical spectra in the range of 800 ~ 1600 eV was discussed, and the vibration modes of absorption peaks were theoretically assigned. The results showed that 1-naphthol has five absorption peaks in the range of 0.5 ~ 4.0 THz, including 1.14 THz, 1.60 THz, 2.16 THz, 2.81 THz and 3.56 THz. The theoretical absorption spectrum obtained at 1400 eV and the measured absorption spectrum have good consistency in the number of absorption peaks, peak position and normalized peak intensity. The vibration modes of the five absorption peaks are caused by the out-of-plane oscillation vibration or in-plane torsional vibration bound by hydrogen bonds in the plane of the two-dimensional ring. This provides an experimental and theoretical basis for the identification of 1-naphthol by terahertz technology, which has certain theoretical significance and practical application value.

**Key words:** Terahertz; Density functional theory (DFT); Theoretical spectrum; 1-naphthol

## 1 引言

太赫兹 (THz) 是频率在 0.1 ~ 10 THz 范围内

的电磁波, 其光子能量与大部分有机分子的振转能级跃迁的能量相当, 因此分子间弱相互作用 (如氢键、色散力)、大分子的骨架振动及晶格的

收稿日期: 2023-10-10

作者简介: 王利民 (1973—), 男, 主要从事煤化工研究. E-mail: 2931229817@qq.com

通信作者: 孙延华. E-mail: 1310695565@qq.com

低频振动导致的吸收处于太赫兹波段<sup>[1]</sup>。太赫兹技术因其测定快速、有独特的特征吸收峰等优势,已在公共安全、化工检测、物质鉴别、生物医学等领域有了初步应用,展现出重大的科学价值和诱人的应用前景。对物质在太赫兹波段的特征吸收峰及其振动模式进行理论研究,有助于理解太赫兹吸收谱的成因,因此,近年来,多位学者对物质的太赫兹吸收谱进行了理论仿真研究<sup>[2-5, 11-16]</sup>。肖田田等<sup>[2]</sup>利用太赫兹光谱和密度泛函理论研究了药物烟酰胺-庚二酸共晶体的多晶型,两种晶型的特征吸收峰不同,理论计算结果表明实验峰与理论峰基本对应,特征吸收峰来源于分子骨架的振动与包含氢键的振动。李桂林<sup>[3]</sup>获得了甲硝唑在太赫兹波段的分子振动频率,并对甲硝唑的特征吸收峰进行了指认。李天莹等<sup>[4]</sup>对食品添加剂的太赫兹光谱进行研究,表明经色散校正后的模型适用于富含氢键的系统,能够提高模拟光谱预测精度。张同军等<sup>[5]</sup>对杀虫剂啉虫脒太赫兹光谱进行了实验和理论研究,采用基于平面波赝势和广义梯度近似(GGA)的PW91, PBE, PBEsol 和 WC 四种交换相关泛函进行几何优化和晶格动力学计算,发现 PBE 方法获得的理论仿真谱与实验吸收谱也最为吻合。

1-萘酚是煤化工产物萘的合成产物,是一种重要的杀虫剂、染料及医药工业的原料,也用于生产塑料、橡胶防老剂、彩色电影胶片成色剂等。同时,1-萘酚是一种危害环境和人体健康的多环芳烃。国内学者徐慧<sup>[6]</sup>、国外学者 Ponseca<sup>[7]</sup>研究了1-萘酚的实测太赫兹光谱,目前国内外还没有学者对1-萘酚的理论光谱和振动模式进行研究。

采用太赫兹时域光谱技术,获得了室温下1-萘酚在0.5~4.0 THz 的太赫兹吸收谱,并基于密度泛函理论(DFT)开展了1-萘酚晶体的太赫兹吸收谱的理论计算,探讨了平面波截断能在800~1600 eV 范围内对理论光谱的影响,获得了与实测匹配度最高的理论光谱,从理论角度解释了实测吸收峰的振动模式,分析了振动吸收的成因。

## 2 基本原理

### 2.1 样品及制备

实验所用1-萘酚来自北京沃凯生物科技有限公司,纯度 $\geq 99.0\%$ ,粉末状晶体,CAS号为90-15-3。使用前未进一步纯化。1-萘酚分子式为 $C_{10}H_8O$ ,分子结构见图1。采用压片法制备

样品:取约60 mg置于样品池中,使用压片机采用3 T压力压制1 min,形成直径13 mm、厚度约0.8 mm的片状待检测样。片状待测样前后平面平行,表面无多于粉末。

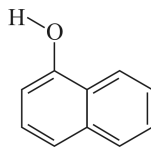


图1 1-萘酚的分子结构

Fig. 1 The molecular structure of 1-naphthol

### 2.2 实验装置及测试方法

实验装置为日本 Advantest 公司的 TAS7400TS 宽带型太赫兹时域光谱仪,采用透射模式,光谱范围0.1~7.0 THz,分辨率7.6 GHz。为了减少空气中水分对测定结果的干扰,对样品仓充高纯氮进行测试,保证样品仓中空气相对湿度 $< 4\%$ 。室温下进行测试,分别测试参考和样品。参考为高纯氮气氛。参考和样品的采集次数为32次。

称量装置为 HC1204 电子天平(上海花潮实业有限公司)。

压片装置为 3887.4NE0000 压片机(CARVER, INC.)。

### 2.3 数据处理

根据 Dorney 和 Duvillaret 等人<sup>[8-10]</sup>提出的材料光学参数的物理模型和菲涅尔法则为基础,获得样品相对于参考的太赫兹波相对吸收强度  $A$ , 计算公式如下:

$$A = T_{ref} - T_{sam}$$

其中,  $A$  是样品相对参考的相对吸收强度, dB;  $T_{ref}$  和  $T_{sam}$  分别是参考和样品信号的经傅立叶变换后的频谱强度, dB。通过将参考和样品的32次时域谱取平均后,进行快速傅立叶变换得到频域谱,获得  $T_{ref}$  和  $T_{sam}$ 。

### 2.4 理论计算

采用 Material Studio 2019 软件,采用晶胞模型进行理论模拟,晶胞模型来自晶体开放数据库(Crystallography open database, COD),1-萘酚 COD ID 为 2203597,其晶胞参数为:  $a = 13.1710 \text{ \AA}$ ,  $b = 4.7980 \text{ \AA}$ ,  $c = 13.2760 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 90^\circ$ ,  $\beta = 117.12^\circ$ ,  $\gamma = 90^\circ$ 。采用平面波赝势模型进行模拟,使用广义梯度近似 GGA-PBE 交换相关泛函,添加了 Grimme 伦敦色散校正系数进

行 DFT-D 色散校正<sup>[11]</sup>. 选择平面波截断能为 800 eV、1000 eV、1200 eV、1400 eV、1600 eV 进行计算, 研究在这 5 个平面波截断能下的理论计算结果. *k* 点是晶胞在倒空间的尺寸表示方法, 选择 *k* 点 0.06 Å 进行计算. 构型优化中, 采用 BFGS 拟牛顿算法对晶胞进行几何优化, 在进行几何优化时, 同时优化晶格参数和原子位置, 当总能量小于  $5.0 \times 10^{-6}$  eV/atom, 最大力小于 0.01 eV/Å, 最大应力小于 0.02 GPa, 最大位移小于  $5.0 \times 10^{-4}$  Å 时, 几何构型收敛, 获得最优构型. 在此构型基础上进行频率计算, 频率计算结果无虚频, 证明是最小能量构型. 频率计算的结果即为理论光谱.

计算得到的 1-萘酚晶胞的最小能量构型及标注原子序号的单分子模型如图 2 所示. 1-萘酚有大量分子间氢键, 图 2(a) 中蓝色虚线为分子间的羟基形成的 O—H···O 型氢键.

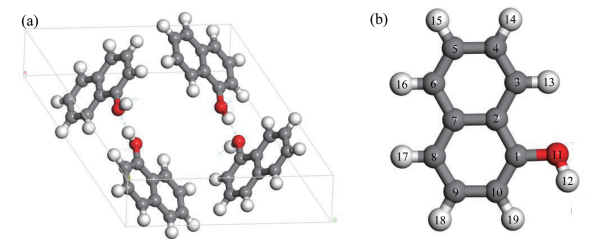


图 2 1-萘酚的模型. (a) 晶胞模型; (b) 单分子模型

Fig. 2 Models of 1-naphthol. (a) Cell model; (b) single molecule model

### 3 分析与讨论

#### 3.1 1-萘酚的太赫兹吸收谱

1-萘酚的太赫兹吸收谱, 如图 3 所示, 由于 0.1~0.5 THz 和 4.0~7.0 THz 范围内的信噪比较差, 因此只选用 0.5~4.0 THz 范围内的吸收谱进行分析. 在 0.5~4.0 THz 范围内, 1-萘酚有 5 个特征吸收峰, 位于 1.14 THz、1.60 THz、2.16 THz、2.81 THz、3.56 THz. 其中, 2.81 THz、3.56 THz 是强吸收峰, 1.14 THz 是较强吸收峰, 1.60 THz、2.16 THz 是弱吸收峰, 为了验证实验得到的吸收谱的正确性, 对比了现有文献, 徐慧<sup>[6]</sup>报道的 1-萘酚在 0.1~2.2 THz 范围内有 1.1 THz 和 1.6 THz 共 2 个吸收峰, 与图 3 的实测吸收谱一致. C. S. Ponseca<sup>[7]</sup>报道了 0.5~6.0 THz 范围内的吸收谱, 因其未标出吸收峰峰位, 大致看起来与图 3 的实测吸收谱是一致的.

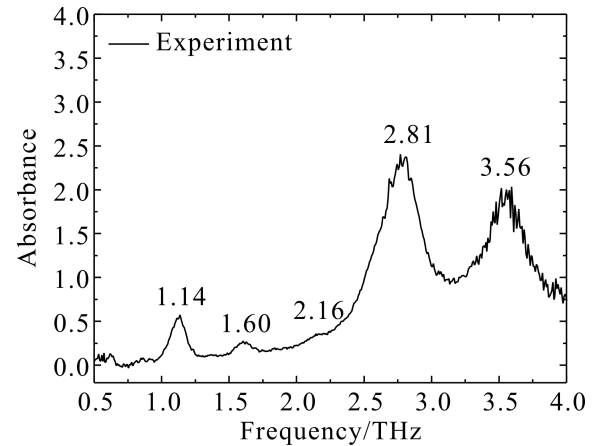


图 3 1-萘酚的太赫兹吸收谱

Fig. 3 The absorption spectrum of 1-naphthol

#### 3.2 理论分析

研究了平面波截断能分别为 800 eV、1000 eV、1200 eV、1400 eV、1600 eV, 其他理论计算条件不变的情况下, 得到的理论吸收谱, 以及与实测吸收谱的对比, 如图 4 所示. 表 1 列出了 1-萘酚在 0.5~4.0 THz 范围内的实测及理论吸收峰的峰位、强度及归一化峰强度, 归一化峰强度是将所有峰强度归一化到 0~1 之间. 1-萘酚在 0.5~4.0 THz 范围内, 平面波截断能为 1400 eV 和 1600 eV 时有 5 个吸收峰, 平面波截断能为 1000 eV 和 1200 eV 时有 6 个吸收峰, 平面波截断能为 800 eV 时有 8 个吸收峰, 平面波截断能为 1400 eV、1600 eV 下的理论吸收谱与实测吸收谱, 在吸收峰个数、峰位、归一化峰强度及谱线形状上均有较好的一致性, 其中 1400 eV 下得到的理论吸收谱峰位、归一化峰强度与实测吸收谱更为接近, 1400 eV 下的理论吸收谱与实测吸收谱在 0.5~4.0 THz 范围内的最强峰均为第 4 个吸收峰, 第 2、3、5 个吸收峰的归一化峰强度相差均在 0.03 以内, 第 1 个吸收峰的归一化峰强度相差 0.09.

平面波截断能为 1200 eV、1000 eV、800 eV 下的理论吸收谱与实测吸收谱一致性较差. 分析认为, 平面波截断能为 1200 eV 及以下时计算精度不够, 导致理论吸收谱与实测一致性稍差, 当提高平面波截断能至 1400 eV、1600 eV, 计算精度足以得到与实测吸收谱一致性高的理论吸收谱. 表 2 列出了从 Material Studio 软件中的得到的构型优化完毕后, 不同截断能下的晶胞最终能量, 可以看出, 随着截断能的升高, 最终能量随之降低, 截断能为 1400 eV 时, 最终能量为 -8724.8309

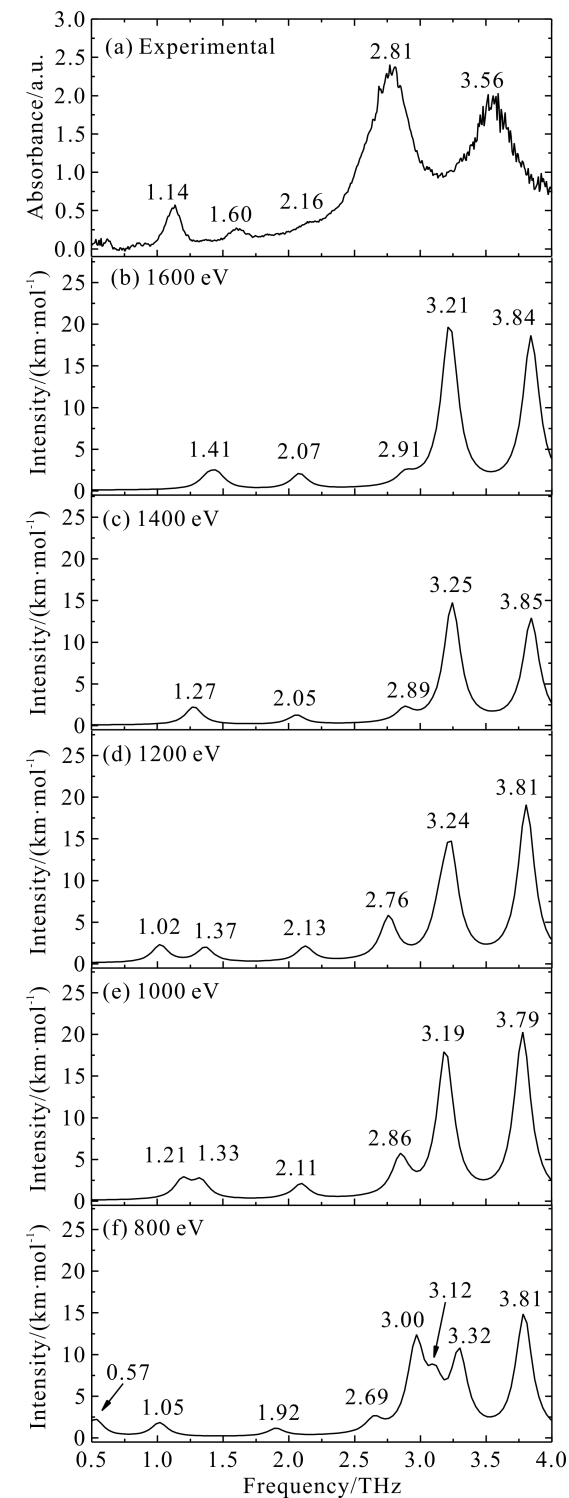


图4 1-萘酚的实测吸收谱与平面波截断能理论吸收谱的对比. (a) 实测吸收谱, 截断能为(b) 1600 eV; (c) 1400 eV; (d) 1200 eV; (e) 1000 eV; (f) 800 eV 的理论谱

Fig. 4 Comparison between the measured absorption spectrum of 1-naphthol and the theoretical absorption spectra of plane wave cut-off energy. (a) Measured absorption spectrum. Theoretical absorption spectra with the cut-off energies at (b) 1600 eV; (c) 1400 eV; (d) 1200 eV; (e) 1000 eV; (f) 800 eV

eV, 截断能为 1600 eV 与 1400 eV 对比, 最终能量仅下降了 0.0177 eV. 可见, 截断能为 1400 eV 时, 最终能量已趋于稳定, 所以, 截断能为 1400 eV、1600 eV, 计算精度已经足够高, 足以获得与实测一致性高的吸收谱.

但是理论吸收谱与实测仍有偏差, 分析有两个原因, 一是实测光谱是在室温下进行的, 但 DFT 理论光谱是在绝对零度下计算得到的, 温度效应会造成理论光谱的蓝移; 二是理论光谱是采用 GGA-PBE 计算得到的, 任何计算方法都是采用一定程度的近似来描述电子波函数, 计算参数的设置都会影响计算精度, 计算精度的高低也是导致实测与理论光谱有偏差的原因<sup>[11]</sup>.

采用平面波截断能为 1400 eV 下的理论吸收谱对实测吸收谱的特征吸收峰进行振动模式归属, 表 3 列出了 1-萘酚在 0.5~4.0 THz 范围内的实测及平面波截断能为 1400 eV 下的理论吸收峰的峰位及振动模式归属. 分子在 THz 波段的振动主要来自于多个原子参与的变形振动、扭转振动和弯曲振动<sup>[12]</sup>. 通过 Material Studio 软件对振动模式进行观察, 5 个振动模式如图 5 和表 3 所示. 1-萘酚在 0.5~4.0 THz 内的 5 个吸收峰的振动模式均是以两元环为平面的受氢键束缚的面外摇摆振动或者面内扭转振动, 2.81 THz、3.56 THz 处的强吸收是受氢键束缚的面外摇摆震动, 1.60 THz 处的吸收峰是以氢键为中心的面内扭转振动, 氢键形成了较强的相互作用力, 对振动模式形成了一定程度的束缚. 这些振动均是 1-萘酚分子中绝大部分原子都参与的集体振动引起的.

通过理论模拟, 对 1-萘酚在 0.5~4.0 THz 波段内的的吸收峰给出了振动模式归属, 为 1-萘酚的分子鉴别提供了理论依据.

## 4 结 论

通过 THz-TDS 测量了 1-萘酚在 0.5~4.0 THz 波段的吸收谱, 1-萘酚在 2.81 THz、3.56 THz 有 2 个强吸收峰, 1.14 THz 有 1 个较强吸收峰, 1.60 THz、2.16 THz 有 2 个弱吸收峰. 采用密度泛函理论平面波赝势模型进行理论分析, 5 个不同强度的平面波截断能下, 1400 eV 下得到的理论吸收谱峰位、归一化峰强度与实测吸收谱更为接近. 5 个吸收峰的振动模式均是以两元环为平面的受氢键束缚的面外摇摆振动或者面内扭转振动, 均是 1-萘酚分子中绝大部分原子都参与

表 1 1-萘酚的实测与理论光谱峰和归一化峰强度的对比

Table 1 Comparisons of experimental and theoretical spectral peaks and normalized peak intensities of 1-naphthol

Experimental	Absorption peak /THz	/	1.14	1.60	2.16	2.81	/	/	3.56
	Abansorbance/a. u.	/	0.57	0.26	0.35	2.37	/	/	2
	Normalized intensity	/	0.24	0.11	0.15	1	/	/	0.84
Cutoff energy : 1600 eV	Absorption peak /THz	/	1.41	2.07	2.91	3.21	/	/	3.84
	Intensity/ ( km•mol <sup>-1</sup> )	/	2.53	2.09	2.64	19.65	/	/	18.66
	Normalized intensity	/	0.13	0.11	0.13	1	/	/	0.95
Cutoff energy : 1400 eV	Absorption peak /THz	/	1.27	2.05	2.89	3.25	/	/	3.85
	Intensity/ ( km•mol <sup>-1</sup> )	/	2.22	1.25	2.33	14.78	/	/	12.93
	Normalized intensity	/	0.15	0.08	0.16	1	/	/	0.87
Theoretical	Absorption peak /THz	1.02	1.37	2.13	2.76	3.24	/	/	3.81
	Intensity/ ( km•mol <sup>-1</sup> )	2.30	1.99	2.14	5.83	14.72	/	/	19.09
	Normalized intensity	0.12	0.10	0.11	0.31	0.77	/	/	1
Cutoff energy : 1000 eV	Absorption peak /THz	1.21	1.33	2.11	2.86	3.19	/	/	3.79
	Intensity/ ( km•mol <sup>-1</sup> )	2.92	2.79	2.12	5.75	17.92	/	/	20.28
	Normalized intensity	0.14	0.14	0.10	0.28	0.88	/	/	1
Cutoff energy : 800 eV	Absorption peak /THz	0.57	1.05	1.92	2.69	3.00	3.12	3.32	3.81
	Intensity/ ( km•mol <sup>-1</sup> )	2.20	1.84	1.15	2.66	12.38	8.85	10.81	14.86
	Normalized intensity	0.15	0.12	0.08	0.18	0.83	0.60	0.73	1

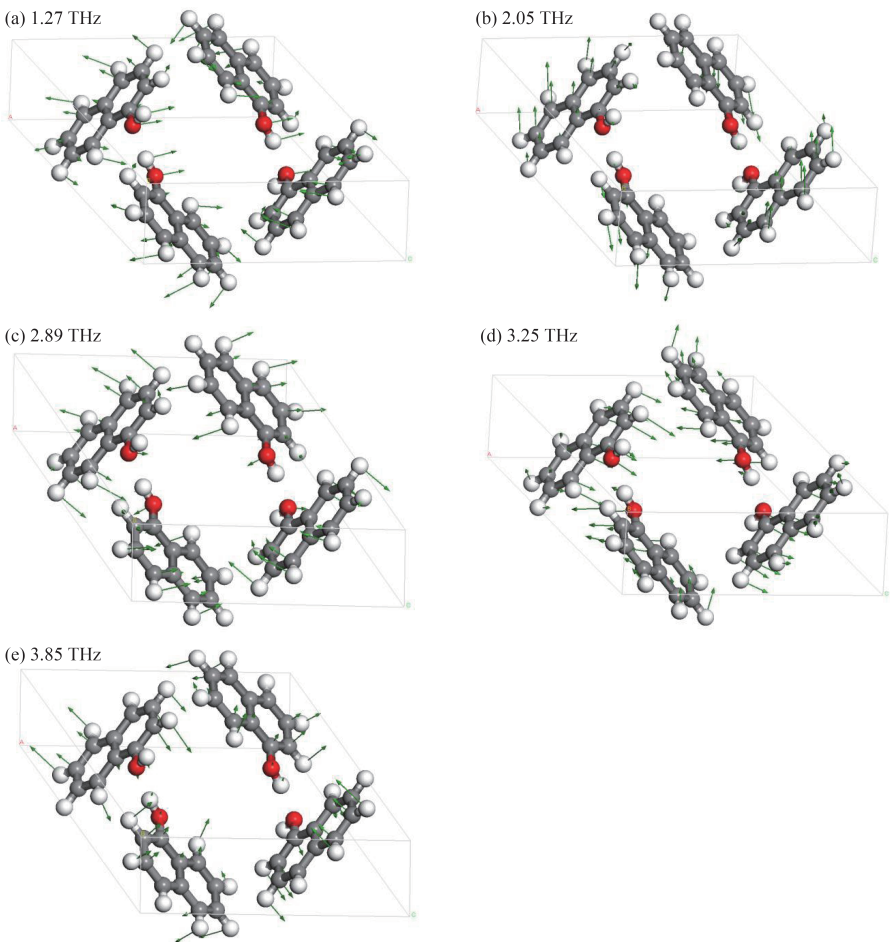


图 5 1-萘酚在平面波截断能为 1400 eV 下的理论吸收峰的振动模式 . (a) 1.27 THz; (b) 2.05 THz; (c) 2.89 THz; (d) 3.25 THz; (e) 3.85 THz

Fig. 5 Vibration modes of theoretical absorption peaks of 1-naphthol at plane wave cutoff energy of 1400 eV. (a) 1.27 THz; (b) 2.05 THz; (c) 2.89 THz; (d) 3.25 THz; (e) 3.85 THz

表2 不同截断能下的晶胞最终能量

Table 2 Final energies at different cut – off energies of cell

Cutoff energy/eV	Final energy/eV
800	– 8722. 85642
1000	– 8724. 62916
1200	– 8724. 77715
1400	– 8724. 83090
1600	– 8724. 84856

表3 1 – 萘酚的实测光谱与理论峰位对比和振动模式归属

Table 3 Comparisons of experimental and theoretical peak positions and vibration mode attributions of 1 – naphthol

Characteristic absorption peak /THz		Vibration mode attribution
Experimental	Theoretical	
1. 14	1. 27	In – plane torsion and out – of – plane rocking vibration centered on C2
1. 60	2. 05	Reciprocating motion along the B – axis and in – plane torsion vibration centered on O—H…O hydrogen bond
2. 16	2. 89	Out – of – plane rocking vibration perpendicular to the two – membered ring, and centered on O—H … O hydrogen bond
2. 81	3. 25	Out – of – plane rocking vibration with the line between C1 – C10 bond and C7 – C8 bond as axis
3. 56	3. 85	Out – of – plane rocking vibration perpendicular to the two – membered ring with the C7 – C8 line as axis

的集体振动引起的. 在 0.5 ~4.0 THz 范围内建立 1 – 萘酚的太赫兹指纹谱, 具有一定的理论意义和实际应用价值.

参考文献:

[1] Xu J Z, Zhang X C. *Technology and applications of terahertz wave*[M]. Beijing: Peking University Press, 2007: 89 (in Chinese) [许景周, 张希成. 太赫兹波科学技术与应用[M]. 北京:北京大学出版社, 2007]

[2] Xiao T T, Tang H Q, Zhang Z, *et al.* Terahertz spectroscopic and density functional theory investigation on the polymorph of the cocrystals of nicotinamide and pimelic acid[J]. *Spectrosc. Spectral Anal.*, 2019, 39: 1386 (in Chinese) [肖田田, 唐汉秦, 张卓勇, 等. 利用太赫兹光谱和密度泛函理论研究烟酰胺 – 庚二酸共晶体的多晶型[J]. 光谱学与光谱分析, 2019, 39: 1386]

[3] Li G L, Deng H, Liu Q C, *et al.* Terahertz characteristic absorption spectral analysis of metronidazole[J]. *Laser Optoelectron. Prog.*, 2020, 57: 291 (in Chinese) [李桂林, 邓琥, 刘泉澄, 等. 甲硝唑的太赫兹特征吸收光谱分析[J]. 激光与光电子学进展, 2020, 57: 291]

[4] Li T Y, Li C, Zhang L, *et al.* Investigation on terahertz spectroscopy of food additives based on dispersion – correction functional theory[J]. *Spectrosc. Spectral Anal.*, 2021, 41: 100 (in Chinese) [李天莹, 李春, 章龙, 等. 基于色散校正的密度泛函理论的食品添加剂太赫兹光谱研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2021, 41: 100]

[5] Zhang T J, Li D H, Cao Q H, *et al.* Experimental measurement and theoretical simulation on terahertz spectra of crystal acetamidrid[J]. *Spectrosc. Spectral Anal.*, 2021, 41: 2012 (in Chinese) [张同军, 李德华, 曹秋红, 等. 啉虫脒太赫兹光谱的实验研究和理论模拟[J]. 光谱学与光谱分析, 2021, 41: 2012]

[6] Xu H, Han J G, Yu X H, *et al.* THz time – domain spectroscopy of polyring aromatic compounds in solid phase[J]. *Chem. Bull.*, 2005, 68: 220 (in Chinese) [徐慧, 韩家广, 余笑寒, 等. 固态多环芳烃化合物的 THz 时域光谱研究[J]. 化学通报, 2005, 68: 220]

[7] Ponseca C, Quema A, De Los Reyes G, *et al.* *Terahertz transmission spectroscopic analysis of mono – and di – substituted hydroxynaphthalenes in the 0.5 to 6 THz region using GaP THz wave generator*[C]. Shanghai: 2006 Joint 31st International Conference on Infrared Millimeter Waves and 14th International Conference on Terahertz Electronics, 2006.

[8] Dorney T, Baraniuk R, Mittleman D. Material parameter estimation with terahertz time – domain spectroscopy[J]. *J. Opt. Soc. Am. A*, 2001, 18: 1562.

[9] Duvillaret L, Garet F, Coutaz J. A reliable method for extraction of material parameters in terahertz time – domain spectroscopy[J]. *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.*, 1996, 2: 793.

[10] Duvillaret L, Garet F, Coutaz J. Highly precise determination of optical constants and sample thickness in terahertz time – domain spectroscopy[J]. *Appl. Opt.*, 1999, 38: 409.

[11] Stefan G. Semiempirical GGA – type density functional constructed with a long – range dispersion correction[J]. *J. Comput. Chem.*, 2006, 27: 1787.

[12] Wang X M, Wang W N. Terahertz time – domain

- spectroscopy of sulfur – containing amino acids [J]. *Acta Chim. Sin.*, 2008, 66: 2248.
- [13] Sun L, Zhou M, Wu M X, *et al.* Detection of two isomers of dichloroaniline by terahertz time – domain spectroscopy [J]. *J. THz Sci. Electr. Inf. Technol.*, 2022, 20: 438 (in Chinese) [孙丽,周铭,吴玫晓,等. 太赫兹技术对二氯苯胺两种同分异构体的检测[J]. 太赫兹科学与电子信息学报, 2022, 20: 438]
- [14] Tang X, Zhou S L, Zhu S P, *et al.* Analysis and identification of terahertz tartaric acid spectral characteristic region based on density functional theory and bootstrapping soft shrinkage method [J]. *Spectrosc. Spectral Anal.*, 2022, 42: 2740 (in Chinese) [唐鑫,周胜灵,祝诗平,等. 基于密度泛函理论与自举软缩减法的酒石酸太赫兹光谱特征谱区分析指认[J]. 光谱学与光谱分析, 2022, 42: 2740]
- [15] Zhang H, Zhang Z H, Zhao X Y, *et al.* Assignment of terahertz vibrational modes of L – glutamine using density functional theory within generalized – gradient approximation [J]. *Chin. Phys. B*, 2015, 24: 073301.
- [16] Zhang H. *Quantum – chemical calculations of terahertz vibration modes and quantitative analyses of amino acids* [D]. University of Science and Technology Beijing, 2016 (in Chinese) [张寒. 氨基酸太赫兹振动模式的量子化学计算及定量分析研究[D]. 北京科技大学, 2016]