

# Density Functional Theory Study on Raman Spectra of Morphine Drugs and Its Application

Yahong Zhou<sup>1,2\*</sup>, Tian Zheng<sup>1,2</sup>, Yufan Ma<sup>3</sup>, Guoping Wu<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Department of Criminal Science and Technology, Jiangsu Police Institute, Nanjing Jiangsu

<sup>2</sup>Jiangsu Provincial Engineering Laboratory for Technical Inspection of Food, Drug and Environmental Crime, Nanjing Jiangsu

<sup>3</sup>Changshu Public Security Bureau Patrol Special Police Brigade, Changshu Jiangsu

Email: [zhouyahong@jspi.cn](mailto:zhouyahong@jspi.cn), [zhengtian@jspi.cn](mailto:zhengtian@jspi.cn), [903840963@qq.com](mailto:903840963@qq.com), [wuguoping@jspi.cn](mailto:wuguoping@jspi.cn)

Received: Oct. 15<sup>th</sup>, 2019; accepted: Nov. 4<sup>th</sup>, 2019; published: Nov. 11<sup>th</sup>, 2019

## Abstract

Based on the research of molecular structure and spectrum of morphine based on density functional theory, this topic uses 6-311+G\* to optimize the geometric configuration of morphine molecules, and obtains Raman spectrum of morphine drugs through frequency calculation. On this basis, it uses gauss view software to analyze the vibration mode of molecules in detail, discusses the difference between theoretical Raman spectrum of morphine molecules and actual Raman spectrum of detection, and the conclusion provides theoretical basis for the actual detection of morphine molecules, so as to achieve the purpose of monitoring and monitoring morphine drugs. The research results provide a theoretical basis for the rapid detection of morphine and other drugs in the future.

## Keywords

Density Functional Theory, Raman Spectroscopy, Gaussian Computing Software, Morphine Drugs

# 吗啡拉曼光谱的密度泛函理论计算及其应用研究

周亚红<sup>1,2\*</sup>, 郑天<sup>1,2</sup>, 马雨凡<sup>3</sup>, 吴国萍<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>江苏警官学院刑技系, 江苏 南京

<sup>2</sup>江苏省食品药品与环境犯罪检验技术工程实验室, 江苏 南京

\*通讯作者。

<sup>3</sup>常熟市公安局巡特警大队, 江苏 常熟

Email: zhouyahong@jspi.cn, zhengtian@jspi.cn, 903840963@qq.com, wuguoping@jspi.cn

收稿日期: 2019年10月15日; 录用日期: 2019年11月4日; 发布日期: 2019年11月11日

## 摘要

本课题基于密度泛函理论的吗啡类分子结构与光谱的研究, 利用6-311+G\*机组对吗啡类毒品分子进行几何构型优化, 并通过频率计算, 获得吗啡类毒品的拉曼光谱, 在此基础上, 用高斯计算软件对分子的振动模式进行详细的分析, 探讨吗啡类分子理论计算拉曼光谱与实际检测拉曼光谱的差异, 得到其识别模型, 为吗啡类分子实际检测提供理论基础, 以此来达到监控监测吗啡类毒品的目的。

## 关键词

密度泛函理论, 拉曼光谱, 高斯计算软件, 吗啡类毒品

Copyright © 2019 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 引言

毒品问题在我国仍然是一个巨大问题。近年来, 在我国南部地区, 尤其是云南, 广东等地, 毒品走私活动仍是十分猖獗, 公安部门对其的打击一刻也没有放松。基于目前日益严峻的毒品问题, 能否快速检验出查获的物品为何类毒品, 关乎这一线公安打击毒品工作的效率性和准确性。国内外对毒品检测的方法主要有常规化学方法, 薄层色谱法, 光谱法, 免疫学分析方法, 气相色谱法和气相色谱-质谱联用法, 高效液相色谱和高效液相色谱-质谱联用法, 毛细管电泳分析[1] [2] [3] [4] [5]。在理论研究方面主要有谢云飞利用 B3LYP/6-31G(d,p), 计算了葱、苊、屈、苯并菲以及晕苯的光谱进行了理论计算[6]; Rigolio 利用方法计算了几种 PAHs 的结构和拉曼频率。分析比较了不同大小和形状的拉曼光谱振动频率, 发现计算的拉曼光谱与实测光谱基本保持一致, 并且探讨几种振动模式同筒正坐标之间的关系[7]。但涉及毒品方面的研究相对较少。

本文主要对吗啡进行拉曼光谱的密度泛函理论计算, 并把理论计算值与实测增强拉曼光谱值进行比较, 找出它们的特征峰, 由此建立吗啡类毒品拉曼光谱检测模型, 应用于公安基层的检测中, 为吗啡的检测提供理论基础, 达到快速检验检测吗啡类毒品的目的。

## 2. 实验内容

### 2.1. 软件程序

本文中理论计算所用的计算机配置如下, CPU: AMD A8-5550M, 内存: 4G 硬盘: 500G 操作系统: Window7 旗舰版。所有计算均采用 Gaussian09 程序包完成, 使用 B3LYP/6-311+G\*机组在 Gaussian09 程序包中进行优化计算, 然后借助 Gauss View5.0 软件完成分子振动分析, 得到相应的拉曼光谱图[8] [9] [10]。

## 2.2. 实验仪器和试剂

实验试剂：本文所采用的吗啡类毒品试剂为公安部二所提供，溶剂为乙醇，浓度为  $100 \mu\text{g}\cdot\text{mL}^{-1}$ 。

实验仪器：本文所采用的仪器为简智公司提供的便携式拉曼光谱仪，型号 ssr-3000。

## 2.3. 拉曼光谱实际检测

本文实践检测所配置的吗啡的浓度为  $100 \mu\text{g}\cdot\text{mL}^{-1}$ ，溶剂为乙醇溶液。配置好的吗啡溶液用简智公司提供的便携式拉曼光谱仪在增敏条件下进行检测，得到其实际拉曼光谱。

## 3. 结果与讨论

### 3.1. 吗啡分子的理论计算结果

#### 3.1.1. 吗啡的分子结构

首先利用 B3LYP/6-311+G\*机组，在 Gaussian09 软件中进行结构优化，得到吗啡分子中键长键角的数据，见表 1；优化后的吗啡分子结构图见图 1。

**Table 1.** The bond length angle of morphine

**表 1.** 吗啡分子结构优化后的键长和键角

键	键长	键	键长	键角	角度(°)	键角	角度(°)
C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub>	1.4019	H <sub>22</sub> -C <sub>1</sub>	1.0854	C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	116.8499	C <sub>6</sub> -C <sub>1</sub> -H <sub>22</sub>	120.0861
C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	1.3899	H <sub>23</sub> -C <sub>6</sub>	1.0861	C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub>	120.4677	C <sub>1</sub> -C <sub>6</sub> -H <sub>23</sub>	118.7272
C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub>	1.3813	H <sub>24</sub> -C <sub>8</sub>	1.0988	C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	123.5575	C <sub>7</sub> -C <sub>8</sub> -H <sub>24</sub>	106.6950
C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	1.3851	H <sub>25</sub> -C <sub>9</sub>	1.0933	C <sub>2</sub> -C <sub>1</sub> -C <sub>6</sub>	121.7634	C <sub>8</sub> -C <sub>9</sub> -H <sub>25</sub>	108.7889
C <sub>6</sub> -C <sub>1</sub>	1.3996	H <sub>26</sub> -C <sub>10</sub>	1.0946	C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub> -C <sub>7</sub>	109.5468	C <sub>5</sub> -C <sub>10</sub> -H <sub>26</sub>	111.0920
C <sub>7</sub> -C <sub>4</sub>	1.4932	H <sub>27</sub> -C <sub>10</sub>	1.0949	C <sub>4</sub> -C <sub>7</sub> -C <sub>8</sub>	104.2590	C <sub>5</sub> -C <sub>10</sub> -H <sub>27</sub>	107.7405
C <sub>8</sub> -C <sub>7</sub>	1.5519	H <sub>28</sub> -C <sub>11</sub>	1.0906	C <sub>7</sub> -C <sub>8</sub> -C <sub>9</sub>	106.4158	C <sub>7</sub> -C <sub>11</sub> -H <sub>28</sub>	111.9703
C <sub>9</sub> -C <sub>8</sub>	1.5426	H <sub>29</sub> -C <sub>12</sub>	1.1009	C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub> -C <sub>10</sub>	118.4315	C <sub>11</sub> -C <sub>12</sub> -H <sub>29</sub>	107.7938
C <sub>10</sub> -C <sub>5</sub>	1.5241	H <sub>30</sub> -C <sub>13</sub>	1.0855	C <sub>4</sub> -C <sub>7</sub> -C <sub>11</sub>	102.3427	C <sub>12</sub> -C <sub>13</sub> -H <sub>30</sub>	116.9572
C <sub>11</sub> -C <sub>7</sub>	1.5483	H <sub>31</sub> -C <sub>14</sub>	1.0858	C <sub>7</sub> -C <sub>11</sub> -C <sub>12</sub>	112.1776	C <sub>13</sub> -C <sub>14</sub> -H <sub>31</sub>	121.9278
C <sub>12</sub> -C <sub>11</sub>	1.5397	H <sub>32</sub> -C <sub>15</sub>	1.0947	C <sub>11</sub> -C <sub>12</sub> -C <sub>13</sub>	109.6397	C <sub>7</sub> -C <sub>15</sub> -H <sub>32</sub>	107.9181
C <sub>13</sub> -C <sub>12</sub>	1.5147	H <sub>33</sub> -C <sub>15</sub>	1.0946	C <sub>12</sub> -C <sub>13</sub> -C <sub>14</sub>	120.1936	C <sub>7</sub> -C <sub>15</sub> -H <sub>33</sub>	109.3682
C <sub>14</sub> -C <sub>13</sub>	1.3382	H <sub>34</sub> -C <sub>16</sub>	1.0938	C <sub>4</sub> -C <sub>7</sub> -C <sub>15</sub>	115.2729	C <sub>15</sub> -C <sub>16</sub> -H <sub>34</sub>	109.4590
C <sub>15</sub> -C <sub>7</sub>	1.5462	H <sub>35</sub> -C <sub>16</sub>	1.1045	C <sub>7</sub> -C <sub>15</sub> -C <sub>16</sub>	113.5587	C <sub>15</sub> -C <sub>16</sub> -H <sub>35</sub>	110.3450
C <sub>16</sub> -C <sub>15</sub>	1.5255	H <sub>36</sub> -C <sub>18</sub>	1.0927	C <sub>15</sub> -C <sub>16</sub> -N <sub>17</sub>	110.4942	C <sub>17</sub> -C <sub>18</sub> -H <sub>36</sub>	109.8741
N <sub>17</sub> -C <sub>16</sub>	1.4625	H <sub>37</sub> -C <sub>18</sub>	1.0930	C <sub>16</sub> -N <sub>17</sub> -C <sub>18</sub>	112.3009	C <sub>17</sub> -C <sub>18</sub> -H <sub>37</sub>	109.3784
C <sub>18</sub> -N <sub>17</sub>	1.4569	H <sub>38</sub> -C <sub>118</sub>	1.1032	C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub> -O <sub>19</sub>	119.6749	C <sub>17</sub> -C <sub>18</sub> -H <sub>38</sub>	113.8972
O <sub>19</sub> -C <sub>2</sub>	1.3729	H <sub>39</sub> -C <sub>19</sub>	0.9667	C <sub>11</sub> -C <sub>12</sub> -O <sub>20</sub>	112.1417	C <sub>2</sub> -C <sub>19</sub> -H <sub>39</sub>	109.9483
O <sub>20</sub> -C <sub>12</sub>	1.4290	H <sub>40</sub> -C <sub>20</sub>	0.9657	C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> -O <sub>21</sub>	126.0735	C <sub>12</sub> -C <sub>20</sub> -H <sub>40</sub>	108.7627
O <sub>21</sub> -C <sub>3</sub>	1.3784						

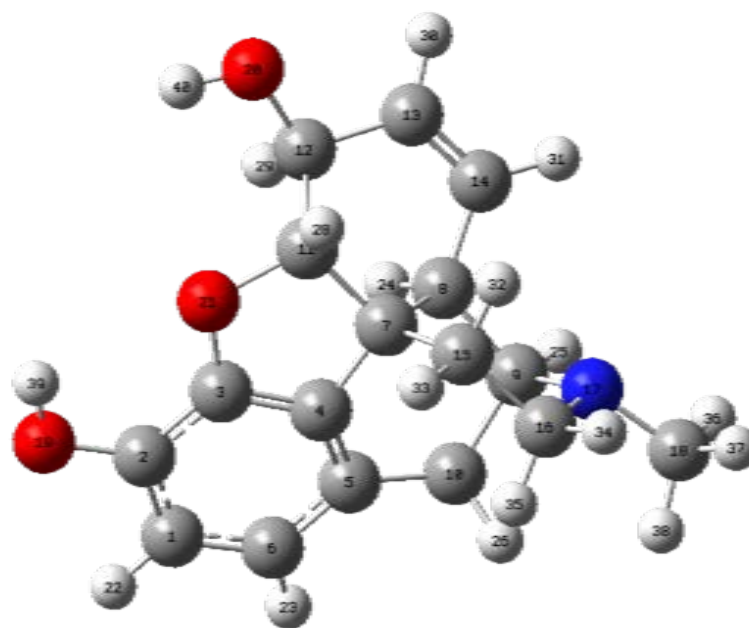


Figure 1. Optimized structure of morphine  
图 1. 优化后吗啡的结构

### 3.1.2. 吗啡分子的溶剂化效应

吗啡分子在理论计算中默认是分子在真空中计算，所以分子间振动并不受溶剂的影响，而当吗啡分子溶于水或者乙醇中时，因为水和乙醇都是极性较大的分子，所以吗啡分子间振动收到溶剂的影响远比在真空中收到的影响大。而实际检测中被检测物都是溶于水或者溶于乙醇中的，分子间振动会受到溶剂的影响，因此本文中所进行的计算则是在溶剂为水或是乙醇的条件下进行的，以此来贴近实际。而在实际检测中被检测物以液态水作为溶剂时，分子是由有序结合的整体晶格区与水分子以氢键结合的无序排列区所组成；各区域均为单体的水所渗透并散布着许多无序的空穴、空格和笼子。而有机溶剂(如乙醇)也具有类似结构，水和乙醇都是极性较大的分子，吗啡也是极性分子，并且根据相似相溶原理，吗啡在乙醇溶液中有着更好的溶解效果，但是溶解效果好只是在测量上能够更容易的出峰，所以吗啡在水溶液中的计算结果与在乙醇溶液中的计算结果在相同频率上的拉曼活性强度只有个位数的差别，故可以认为不同溶剂如水或乙醇对吗啡分子的影响不大。

### 3.1.3. 吗啡分子拉曼光谱理论计算谱图

利用 Gaussview5.0 软件进行频率分析，得到吗啡的拉曼光谱数据，对于非直线分子的振动形式应有  $3n-6$  中，其中  $n$  为原子个数。吗啡分子式为  $C_{17}H_{19}NO_3$ ，共有 40 个原子，所以应有 114 种分子振动形式，见表 2，吗啡的理论计算拟合的拉曼谱图见图 2。

Table 2. Raman spectra of morphine by calculated theory

表 2. 吗啡的理论计算的拉曼频率

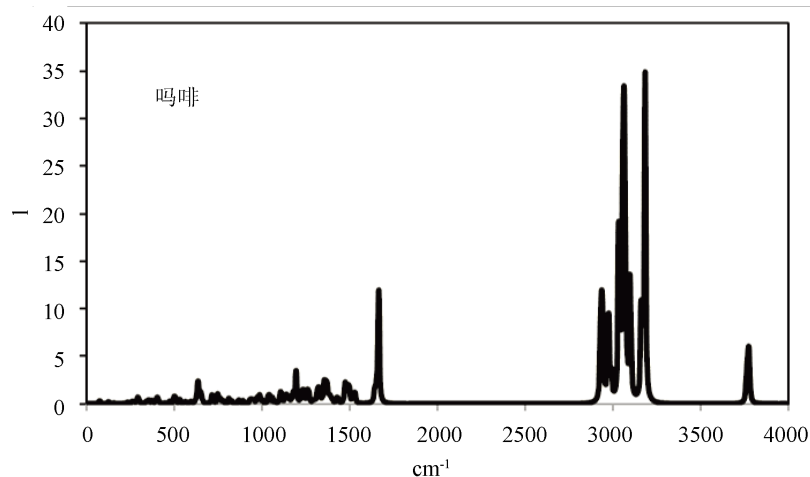
序号	频率	拉曼强度	序号	频率	拉曼强度	序号	频率	拉曼强度
1	60.3500	1.2117	39	826.0100	4.9228	77	1364.7300	50.2266
2	70.3000	4.3940	40	866.0200	6.4782	78	1374.0800	5.8061
3	119.2700	1.6389	41	889.2100	4.9100	79	1379.4800	4.7955

## Continued

---

4	24.5300	2.1738	42	930.6200	6.4092	80	1386.1600	9.9171
5	154.3400	1.4350	43	934.9700	1.7996	81	1390.3100	3.9705
6	204.9300	0.6451	44	940.8400	6.1292	82	1397.8900	4.9966
7	220.5900	1.3770	45	949.8500	5.3861	83	1422.5600	5.0299
8	232.5700	1.8183	46	968.9500	7.0520	84	1428.7600	12.5721
9	256.1800	2.6353	47	973.3200	5.4839	85	1469.1000	5.4270
10	266.0200	1.8897	48	985.0300	11.6888	86	1472.6400	29.8556
11	273.1200	0.6351	49	998.8600	4.9075	87	1484.3400	19.5428
12	278.2100	0.8878	50	1033.2800	9.6459	88	1488.3000	14.2183
13	291.2400	13.3833	51	1039.6300	10.7652	89	1495.1000	25.5821
14	310.3000	0.2509	52	1057.0000	8.6311	90	1515.6700	6.7944
15	334.9700	1.0851	53	1072.1000	1.9649	91	1524.5700	27.7357
16	338.7400	1.7944	54	1099.5400	6.8865	92	1530.3900	4.2549
17	348.8100	7.4005	55	1104.4600	5.6634	93	1643.9900	40.1762
18	370.5700	5.7359	56	1107.4300	16.5860	94	1661.5700	112.0594
19	393.7700	4.5521	57	1131.7900	13.1152	95	1663.9500	125.5568
20	402.7700	11.0858	58	1140.1000	15.8174	96	2928.6000	134.8562
21	444.5000	1.3681	59	1154.1100	6.8905	97	2938.7800	418.0266
22	472.4600	3.3446	60	1167.7800	2.7835	98	2972.5000	280.6116
23	499.4200	16.6009	61	1172.9400	2.8536	99	2989.1600	87.7172
24	506.8900	1.2771	62	1177.8800	15.6550	100	3032.8900	202.5507
25	528.2900	5.7865	63	1191.8700	51.0478	101	3034.2200	325.5334
26	556.9700	1.8476	64	1221.8800	14.1844	102	3054.9800	94.6492
27	564.1900	2.9042	65	1227.7100	3.8091	103	3055.6400	298.0908
28	589.9000	3.4822	66	1232.8300	12.7519	104	3060.1600	328.6021
29	621.4200	5.0972	67	1235.0400	8.5108	105	3065.0900	570.9544
30	631.0200	30.7310	68	1254.9500	20.4848	106	3073.7900	190.4121
31	644.7900	25.5573	69	1264.9300	16.7061	107	3098.2700	186.9611
32	657.2700	4.2308	70	1291.2400	5.2115	108	3099.0600	248.3704
33	711.0600	7.4269	71	1299.4100	4.0453	109	3162.8000	195.9042
34	715.3500	8.9798	72	1314.0000	17.9887	110	3163.5300	171.7105
35	745.8700	15.2740	73	1323.3700	32.3042	111	3182.5800	398.5358
36	758.9400	7.1007	74	1340.4400	4.0895	112	3184.3000	522.6912
37	773.3200	5.5753	75	1351.7800	20.1701	113	3765.7300	178.9670
38	808.0400	7.1878	76	1356.1100	25.1495	114	3777.7000	174.8334

---

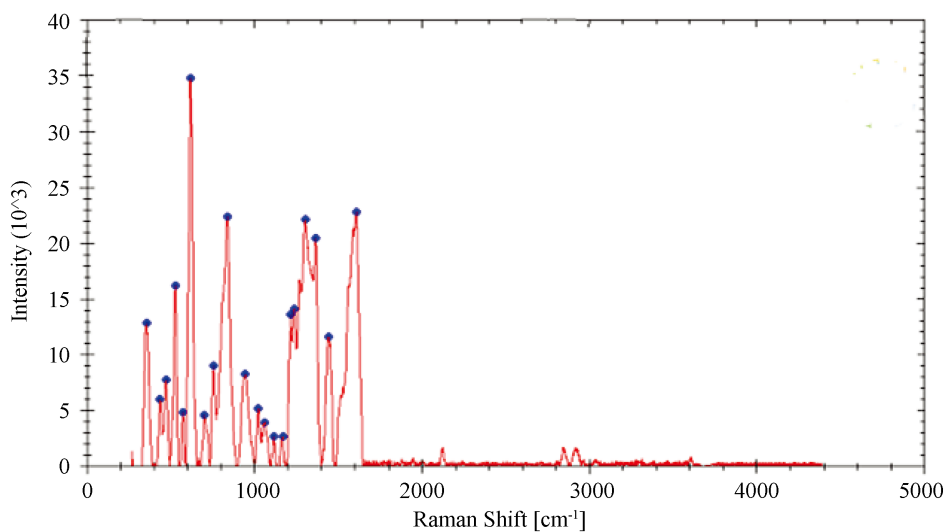


**Figure 2.** Theoretical calculation of Raman spectra of morphine (ethanol solution)  
**图 2.** 吗啡的理论计算拟合的拉曼谱图(乙醇溶液)

计算结果显示, 在  $2900\sim 3400\text{ cm}^{-1}$  附近有较强的特征峰。

### 3.2. 吗啡的拉曼光谱实际检测谱图

将浓度为  $100\text{ }\mu\text{g}\cdot\text{mL}^{-1}$  的吗啡溶液, 用简智公司提供的便携式拉曼光谱仪在增敏条件下进行检测, 得到其实际检测拉曼光谱, 见图 3。



**Figure 3.** Measured Raman spectra of morphine (ethanol solution)  
**图 3.** 实测的吗啡拉曼谱图(乙醇溶液)

图 3 可见用纳米金增敏后, 使得拉曼光谱在  $400\sim 1800\text{ cm}^{-1}$  附近的对称振动频率被增强, 而极性键如羟基、氨基键的振动频率  $2900\sim 3400\text{ cm}^{-1}$  被减弱。

### 3.3. 吗啡实际检测拉曼光谱数据与理论计算值的谱图分析

由理论计算吗啡的拉曼光谱和实际检测拉曼光谱图进行比较, 得出以下特征谱图与结构参数之间的关系, 见表 3。

**Table 3.** Relationship between measured Raman spectra of morphine and theoretical values  
**表 3.** 吗啡的理论计算拉曼频率和实测拉曼频率比较

实测拉曼光谱频率	实测拉曼光谱强度	振动形式	对应理论计算拉曼频率	理论计算拉曼相对强度
355.5	12863	苯环反对称扭曲, CH <sub>3</sub> 摇摆	348.81	7.4005
438.3	5950	苯环反对称扭曲, 面内弯曲	444.50	1.3681
472.3	7731	C <sub>12</sub> O <sub>20</sub> 面内摇摆	472.46	3.3446
528.0	16216	C <sub>13</sub> C <sub>14</sub> 面外弯曲	528.29	5.7865
575.0	4839	苯环面外弯曲	589.9	3.4822
624.2	34694	苯环反对称变形	621.42	5.0972
702.4	4558	C <sub>13</sub> H <sub>30</sub> 面外摇摆	711.06	7.4269
755.5	8996	C <sub>10</sub> H <sub>26</sub> , C <sub>10</sub> H <sub>27</sub> 面内摇摆	758.94	7.1007
839.2	22346	C <sub>15</sub> H <sub>33</sub> , C <sub>15</sub> H <sub>32</sub> 面内摇摆	826.01	4.9228
946.6	8275	C <sub>9</sub> C <sub>10</sub> 面内伸缩	949.85	5.3861
1024.2	5162	C <sub>15</sub> , C <sub>16</sub> 上 CH <sub>2</sub> 面内摇摆	1033.28	9.6459
1061.2	3882	C <sub>12</sub> C <sub>13</sub> 面内伸缩	1057.00	8.6311
1117.3	2672	C <sub>11</sub> C <sub>7</sub> 面内伸缩	1107.43	16.5860
1172.7	2641	C <sub>1</sub> H <sub>22</sub> C <sub>6</sub> H <sub>23</sub> 面内摇摆	1172.94	2.8536
1217.8	13615	C <sub>15</sub> 上 CH <sub>2</sub> 面外摇摆	1221.88	14.1844
1241.4	14064	C <sub>12</sub> H <sub>29</sub> 面内摇摆	1235.04	8.5108
1306.6	22145	C <sub>8</sub> H <sub>24</sub> , C <sub>15</sub> H <sub>33</sub> 面外摇摆	1314.00	17.9887
1368.4	20466	C <sub>9</sub> C <sub>10</sub> 面外摇摆	1364.73	50.2266
1447.0	11591	C <sub>12</sub> H <sub>29</sub> , O <sub>20</sub> H <sub>40</sub> 面外摇摆	1428.76	12.5721
1610.0	22795	苯环面内反对称伸缩	1643.99	40.1762

拉曼效应其实是一个非常弱的效应, 直接在实际中使用仪器进行检测的话, 分子的出峰效率和检测效果都不是十分理想, 加入纳米金等表面增敏剂之后, 可以对分子振动强度增强数个数量级, 这样实际检测拉曼光谱中更容易检出峰, 更加易于观察。

从表 3 的结果来看, 吗啡的实际检测拉曼光谱在吗啡分子整体骨架的扭曲和伸缩振动都有显著的加强, 这是由于实测拉曼光谱中加入了纳米金为增强剂来增强拉曼散射效应, 表面增强拉曼分为物理增强与化学增强两方面, 且物理增强占主导, 对基底附近分子增强较强, 故对分子整体的各种振动都可以增强数个数量级, 所以在表面增强拉曼光谱中, 分子整体振动部分都比理论计算值要来的强。另外实测的吗啡拉曼光谱中, 只有 20 个吸收峰, 主要分布在 300~1700 cm<sup>-1</sup>, 其峰的强度与理论计算值也有所不同, 这可能是由于增强剂对极性键有减弱作用, 因此, 频率在 1700 之后的理论计算值中出现的峰都被较大的削弱了, 吗啡的极性键如 O-H、N-H 在 3000 以上的特征峰几乎不存在了, 但有些特征峰如苯环的振动等的位置基本与理论计算值接近。

综上所述, 吗啡分子的拉曼特征峰主要以下几个: 苯环: 频率在 355.5, 438.3, 1610 附近有较强的峰, 频率在 624.2 附近有很强的峰; C=C: 频率在 1663 附近有较强的峰, 频率在 3184 附近有很强的峰; N 原子: 频率在 3000 附近有连续的较强的峰; 不与苯环相连的羟基: 频率在 3777 附近有较强的峰; 与苯环相连的羟基: 频率在 3760 附近有较强的峰。

## 4. 结论

本论文利用密度泛函理论优化吗啡分子的化学结构, 计算其 Mayer 键级、键角等信息, 讨论了溶剂化效应的影响。比较了理论计算的拉曼光谱图与增敏条件下实测的拉曼光谱图之间的差异, 由此得到吗啡拉曼光谱特征峰识别模型, 为毒品的快速检测, 提供科学方法。本研究对建立新型毒品拉曼光谱识别模式具有一定的借鉴意义。

## 基金项目

江苏省教育厅自然科学重大项目(18KJA620001); 江苏警官学院科研创新团队(2018SJYTD03); 江苏省“十三五”一级学科省重点建设学科资助项目(20160838)。

## 参考文献

- [1] 张丽敏. 毒品检验方法比较[J]. 河北公安警察职业学院学报, 2009, 6(9): 2-3.
- [2] Hosseini, M.H., Alizadeh, N. and Khanchi, A.R. (2010) Solubility Analysis of Clozapine and Lamotrigine in Supercritical Carbon Dioxide using Static System. *The Journal of Supercritical Fluids*, **52**, 30-35.
- [3] 赵霞, 王俭, 温涛, 王义明, 罗国安. 毛细管电泳在毒品检验中的应用[J]. 刑事技术, 2004(2): 28-32.
- [4] 孟品佳. 衍生化气相色谱方法在苯丙胺类毒品分析中的应用[J]. 中国人民公安大学学报(自然科学版), 2006(4): 1-5.
- [5] 欧阳思怡, 叶冰, 刘燕德. 表面增强拉曼光谱法在农药残留检测中的研究进展[J]. 食品与机械, 2013, 29(1): 243-246.
- [6] 谢云飞, 姚卫蓉, 赵冰. 利用密度泛函理论研究六种多环芳烃的分子结构以及拉曼光谱[J]. 光散射学报, 2012(4): 335-338.
- [7] 欧阳思怡, 叶冰, 刘燕德. 表面增强拉曼光谱法在农药残留检测中的研究进展[J]. 食品与机械, 2013, 29(1): 243-246.
- [8] 刘玉敬. 苯酚分子拉曼光谱的密度泛函理论研究[J]. 分子科学学报, 2017, 33(6): 498-501.
- [9] 李震宇, 贺伟, 杨金龙. 密度泛函理论及其数值方法新进展[J]. 化学进展, 2005(2): 192-202.
- [10] 张保华, 江永成, 沙文, 张先焱, 崔执凤. 特征提取算法在福美双表面增强拉曼光谱定量分析中的应用[J]. 光谱学与光谱分析, 2015, 35(2): 390-393.